Szilárdtestfizika

- előadó: Solyom Jenő

  solyom@szfki.hu

  solyom.jeno@wigner.mta.hu

- minden 2. héten lesz csak gyakorlat péntektől
  (első héten előadás lesz csak)

- félév során ZH nem lesz, csak írásbeli vizsga, de lesznek 2 tétel lesz vizsgán!

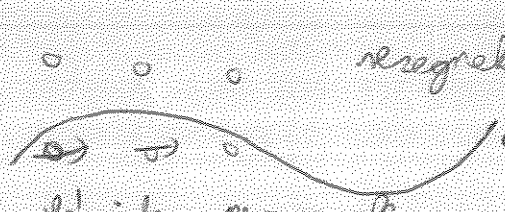
50%-ot kell elérni kisebb gyakorlati feladatokból

1. óra

1) Emlékeztető:

– Kristályos anyagokat összetartó erők:
  - fémes
  - ionos
  - kovalens
  (Van der Waals)

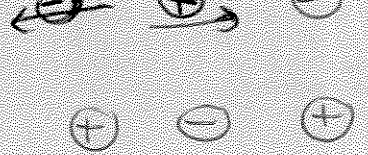
– Kristályokban:



szegnek a részecskéknek (ionok)

- hosszú hullámú (akkusztikus) rezgés

körülöttük mozognak



• rövid hullámú (optikai) rezgések

— az e^--ok tartják össze az anyagokat

• klasszikus modell: Drude-modell: szabad e^- modell (Sommerfeld-modell ⇒ fermion gáz)

• nem szabad e^- → sávszerkezet

félvezető, szigetelő, fémes, szupravezető

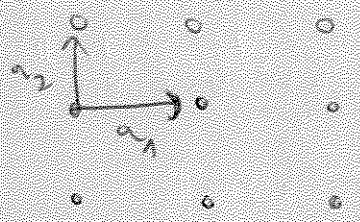
— mágneses tulajdonságok (mágneses rezgések (magnonok))

— anyagvizsgálat: RTG diffrakció
(szabályos szórás)

ismételni: rácsrezgések (egyatomos, kétatomos lánc)

Szimmetriák

1) Translációs:



$$t_n = n_1 \cdot \vec{a}_1 + n_2 \cdot \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

transl. szimm.:

$\exists$ ilyen $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, hogy a kristály $\vec{t}$-vel önmagába vihető le

- Forgási és tükrözési szimm. is van

2) Neumann-elv

Ha egy rendszernek van forgatási és tükr. szimmetriái ~~(irányfüggő mennyi.-k)~~, akkor az irányfüggő mennyiségek is ugyan kapcsolatban állnak egymással, mint a kristály szimm. irányai.

(pl. vezetőképesség)

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}$$

x irányú tér → milyen áram az x irányban?

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \qquad \begin{matrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{matrix}$$

– köbös kristály.ban: $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$

• x tengely a köbös kristály szimm. ⇒ y és -y irány ekvivalens ⇒ $\sigma_{xy} = -\sigma_{xy} = 0$

⇒ offdiagonális elemek 0-k

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & \sigma \end{pmatrix} = \sigma \cdot \underline{\underline{I}}$$

elég egy skalár mennyiség

– de pl. tetragonális rács → x és y irány azonos, z eltérő ⇒ 2 db kül. komponens

3) <u>Wigner-tétel</u>

– szimmetriaműveletek (forgatás, tükr., eltolás, időtükr., mágneskr., ...):

$G_i \in g$ csoport

↓

szimmetriák csoportot alkotnak

$G_i \Rightarrow T(G_i)$

szimm. operátor

$\mathcal{H}(r)$: Hamilton-operátor

Ha a rendszer szimm.-ja a $\mathcal{G}$ csoport, akkor:

$$\mathcal{H}(r) = \mathcal{H}(G_i^{-1} r)$$

$$\Big(\underbrace{T(G_i)}_{\text{transzformáció operátor hatása}} \psi(r) = \psi(G_i^{-1} r) \Big)$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{T(G_i)\big(\mathcal{H}(r)\,\psi(r)\big)}} = \mathcal{H}(G_i^{-1} r)\,\psi(G_i^{-1} r) = \mathcal{H}(r)\,\psi(G_i^{-1} r) =$$

$$= \underline{\underline{\mathcal{H}(r)\,T(G_i)\,\psi(r)}} \quad \text{tetsz. } \psi(r)\text{-re}$$

$\Rightarrow$ $\mathcal{H}(r)$ kommutál $T(G_i)$-vel!

$\mathcal{H}\psi = \varepsilon\psi$ sajátérték egyenlet

$$T(G_i)\,\mathcal{H}(r)\,\psi(r) = \varepsilon\, T(G_i)\cdot\psi(r)$$

$$\mathcal{H}(r)\,\boxed{T(G_i)\,\psi(r)} = \varepsilon\,\boxed{T(G_i)\cdot\psi(r)}$$

$\Rightarrow$ ha $\psi(r)$ sajátállapot, akkor $T\cdot\psi$ is sajátáll. ugyanazzal sajátértékkel

$$n \Rightarrow \left.\begin{array}{l} \psi \\ T(G_1)\,\psi \\ T(G_2)\,\psi \end{array}\right\} n \text{ db sajátállapot, de nem feltétlenül függetlenek}$$

ez a fv. ψ a $\mathcal{G}$ csoport egy ábrázolását adja

⇒ irred. ábrázolás : n db fgtlen s. állapot

red. — " — : szét kell bontani irred. ábrázolásokra

<u>transzlációra:</u>

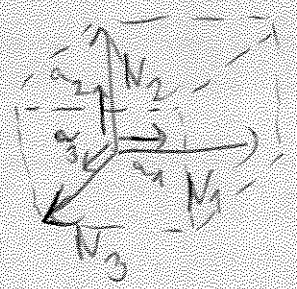
$\psi(r)$ $\quad T(t_n)\cdot\psi(r) = \psi(r-t_n)$

ha $\mathcal{H}(r)$ transzlációinv. ⇒ betsz. t_n-el eltolva sajátall.-okat kapok

fell.: ezek nem fgtlenek! n db fgtlen állapot van!

$\psi(r),\ \psi(r+t_1),\ \psi(r+t_2),\ \dots\ \psi(r+t_n)$

$t_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$



: $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ db atom (rácspont)

: periodikus határfeltétel

$T(t_n)\,\mathcal{H}(r) = \mathcal{H}(r)\,T(t_n)$

$\mathcal{H}(r)\,\psi_\alpha(r) = \varepsilon_\alpha\,\psi_\alpha(r)$

$T(t_n)\,\psi_\alpha(r) = \underbrace{t_\alpha(t_n)}\cdot\psi_\alpha(r)$

$\psi(r) = \psi(r + h_1 N_1\cdot\vec{a}_1 + h_2 N_2\,\vec{a}_2 + h_3 N_3\,\vec{a}_3)$

$\Downarrow$

$$T(N_{-1}) = \psi_2(k_2 - k_{-1}) = 1 \qquad \psi(c_1) = \psi_{-1}$$

$$\psi_2(k_2 - k_{-2}) = 1 \qquad (k_2 + k_{-1}) = \psi_{-1}$$

$$\psi_2(k_2 - k_{-3}) = 1$$

$$\psi(k_{-1}) = (k_{-1})^{\nu} \qquad \frac{\pi}{2}$$

$$(n_1, n_{-1}, n_2, n_{-2}, n_3, n_{-3}, n_4, n_{-4})$$

$$T(N) = (k_{-1})^{n_1} (k_{-2})^{n_2} (k_{-3})^{n_3}$$

$$\Rightarrow \mu_{-1} \quad n_1 = N_1 \quad (k_{-1})^{N_1} = 1 \quad , \quad (k_{-2})^{N_2} = 1 \quad (k_{-3})^{N_3} = 1$$

$$\Rightarrow k_{-1} = e^{-i\pi \frac{n_1}{N_1}} \quad (N_1 = 2n+1, 2n+2) \quad (n_1 \in \mathbb{Z})$$

$$k_{-2} = e^{-i\pi \frac{n_2}{N_2}}$$

$$k_{-3} = e^{-i\pi \frac{n_3}{N_3}}$$

$$\psi(k_1) = e^{-i\pi\left(\frac{n_1}{N_1} + \frac{n_2}{N_2} + \frac{n_3}{N_3}\right)} \qquad k_{-1} \cdot k_{-1}$$

$$k_{-1} = n_1 \tau_1 + n_2 \tau_2 + n_3 \tau_3 \qquad k_{-1} + k_{-1} \qquad (n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z})$$

$$\tau = \frac{n_1}{N_1} \tau_1 + \frac{n_2}{N_2} \tau_2 + \frac{n_3}{N_3} \tau_3$$

$$\text{ie: } \tau_1 \cdot \tau_2 = 2\pi \tau_3 \quad (\tau_1 \cdot \tau_2 = \tau_3 + 2\pi)$$

$$\psi(k_1) = e^{-i\tau \cdot k_1}$$

$$\psi(r-L) = e^{ikL}\psi(r)$$

$$\boxed{\psi(r+L) = e^{ikL}\psi(r)}$$ [illegible]

(periodic boundary [illegible])

[illegible] (Z [illegible])

(periodic) $\vec{k}\cdot\vec{r}$ $\quad \vec{r} = l_1\vec{r}_1 + l_2\vec{r}_2 + l_3\vec{r}_3$

(primitive)

$e^{ikL} = e^{i(k+G)L}$ $\quad \vec{G}\cdot\vec{r} = 2\pi$ [illegible]

$\vec{k} \equiv \vec{k} + \vec{G}$ (equivalent)

([illegible] [illegible] [illegible])

$\Rightarrow$ $\vec{k}$ [illegible] [illegible] [illegible]

$\cup$

$0 \le n_1 \le N_1 - 1$

$0 \le n_2 \le N_2 - 1$ $\quad (n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z})$

$0 \le n_3 \le N_3 - 1$

$\Rightarrow \boxed{N_1 N_2 N_3}$ [illegible] $\vec{k}$ [illegible] (vector) [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible], [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible]

[illegible]

$$\psi(x+a) = \psi(x) + a\psi'(x) + \frac{1}{2}a^2\psi''(x) + \dots = \left(1 + a\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}a^2\frac{d^2}{dx^2} + \dots\right)\psi(x) = e^{a\frac{d}{dx}}\psi(x)$$

$$\Rightarrow \quad p = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}\right)$$

[illegible]

[illegible]

$$\Rightarrow \quad \underline{\text{[illegible]}}$$

[illegible]

[illegible]

$$\Rightarrow \quad \underline{\text{[illegible]}}$$

2. óra

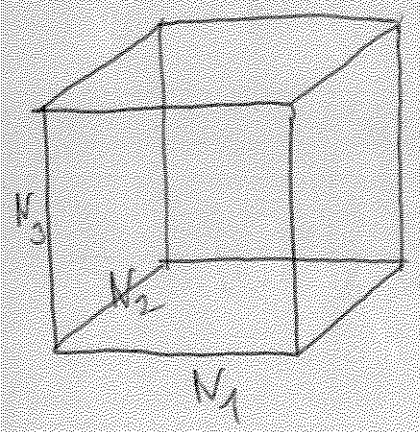
Szimmetriák

0) Ism.

$$t_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$\mathcal{H}(r + t_n) = \mathcal{H}(r)$$

$\psi_k(r)$

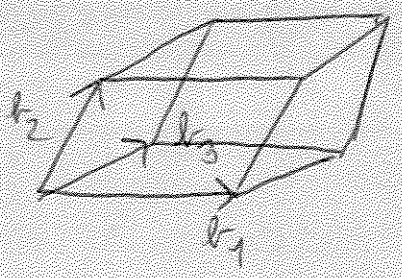


$$\psi_k(r + t_n) = e^{i\vec{k}\vec{t}_n}\, \psi_k(r)$$

$$\vec{k} = \frac{n_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{n_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{n_3}{N_3}\vec{b}_3$$

$$1 \le n_i \le N_i \qquad N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

$$\vec{k} \equiv \vec{k} + \vec{G} \qquad (\vec{G} \text{ reciprokrács-vektor})$$



1) <u>Noether-tétel</u>: eltolási szimm. $\Rightarrow$ impulzus megmaradás

forgatás —"— $\Rightarrow$ „kvázimp." —"—

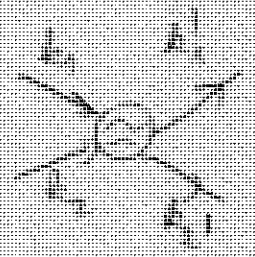
a)

Ha több alrendszer van, és az egyes alrs.-ek eltolási invarianciáját $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3$ vektorok írják le, akkor a teljes rsz. kristályimpulzusa $\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3$ és

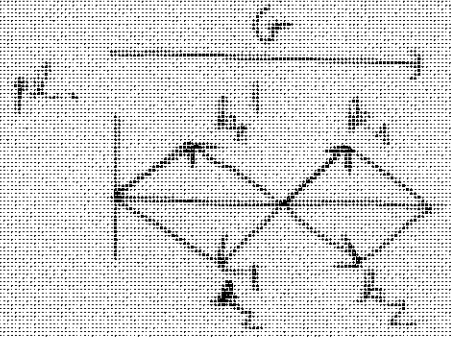
[illegible] → [illegible] $k \to k + G$

$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_1' + \vec{k}_2'$ [illegible]

$\boxed{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_1' + \vec{k}_2' + \vec{G}}$ [illegible]



$k_2 \left| \begin{array}{l} \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_1' + \vec{k}_2' + X \quad (\vec{G} \neq 0) \\ \vec{G} \neq 0 \end{array} \right.$ [illegible]



4) [illegible]:

$k \to -k$

$\sigma \to \sigma$

$p \to -p$

$\sigma \to -\sigma$ (spin in [illegible])

[illegible] (spin-orbit [illegible])

[illegible] imp. momentum

$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \to$ [illegible]

$T\psi(\sigma, p, \sigma) = \psi^*(\sigma, -p, -\sigma)$

[illegible]

T [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]!

mit $\frac{1}{2}$

(mit $\frac{1}{2}$ [illegible] $V(-1)$ multiplikation $\Rightarrow$ [illegible])

$T = UK$ K komplex konjugiert

$U = 1$

$TST^{-1} = -S$ und tut gilt ($\Leftrightarrow TS = -ST$)

und $TST = -S$

$K S K = 1$

S_x, S_y, S_z [illegible] $\Rightarrow$ $K S_x K = S_x$

$K S_y K = -S_y$

$K S_z K = S_z$

also klar $TST^{-1} = -S$

Eigenfunktion, U und K in z eigenfunktion

multiplikation $\Rightarrow$ [illegible] konstant

[illegible]

$\Rightarrow U = \underbrace{e^{-i\pi S_y}}_{\text{Drehung um } y \text{ Achse}} \frac{1}{2} S_y$

$T = UK$ mit

$\Rightarrow T^{k}(\varphi, \vartheta) T^{-1} \underline{\underline{\frac{1}{2} S_y (\pi - \varphi, -\vartheta)}} = R(\pi, \varphi, \vartheta)$

zur [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible]

(Rieder, [illegible] [illegible] [illegible])

$\psi, T\psi$

Da ψ ein $T\psi$ | Eigenfunktion $\Rightarrow$ verschwindet durch physikalische Messung nicht

nur Eigenfunktion $\Rightarrow$ für eigenwertige Messung

$\langle \psi | T\psi \rangle = ?$ z.B. $T = UK$

mit $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^* = (UK\psi, UK\varphi) = (T\psi, T\varphi)$

$$\underline{\underline{(\psi, T\psi)}} = ((T\psi, \psi)^*) = (TT\psi, T\psi) = (-1)(\psi, T\psi) = \underline{\underline{0}}$$

$\Rightarrow T = \sigma_y K \quad T^2 = \underbrace{\sigma_y K \sigma_y}_{-\sigma_y} K = -\sigma_y^2 = -1$

mit $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow$ <u>Kramers-Entartung</u>:

Da ψ mit $T\psi$ individuell gemäß Kramers

in physikalische Größen gleich erscheinen

$\Rightarrow$ ψ eigenfunktionen zweifach degeneriert:

$$\psi_{E,\sigma} \Rightarrow E, \psi_{E,\sigma}$$

$$\psi_{E,-\sigma} \Rightarrow E, \psi_{E,-\sigma} = E, \psi_{E,\sigma}$$

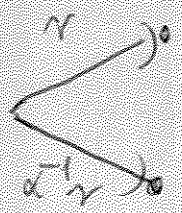
c) α szögű forgatás

(α): $\mathcal{H}(\alpha^{-1} r) = \mathcal{H}(r)$

$$\psi_k(r)$$
$$\downarrow$$
$$T(\alpha)\psi_k(r) \qquad r \to \alpha^{-1} \cdot r$$

$T(t_n)\, T(\alpha)\psi_k(r) = ?$ (hogyan viselkedik eltolásra az új hullámfv.)

$$\underbrace{\psi(\alpha^{-1} r - t_n)}_{\alpha^{-1} r \text{ eltolása } t_n\text{-el}}$$



fordítva csinálva most kell kapjam

$$\underline{\underline{T(t_n)\, T(\alpha)\psi_k(r)}} = T(\alpha) \cdot T(\alpha^{-1} t_n) \cdot \psi_k(r) = (*)$$

$r \to r - \alpha \cdot t_n$

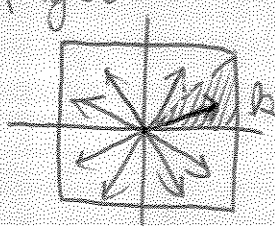
$(\alpha^{-1} r - t_n)$ $\Rightarrow$ $\alpha \cdot t_n$-el kell eltolni, hogy forgatás után az eredetit kapjam

$$(*) = T(\alpha) \cdot e^{ik(\alpha t_n)} \qquad \psi(r) = e^{ikr} \qquad T(\alpha)\psi_k(r) =$$

$$= e^{i(\alpha^{-1} k) \cdot t_n}\, T(\alpha)\psi_k(r)$$

a forgatott hullámfv. eltolási invarianciáját $\alpha^{-1} k$ írja le

pl.



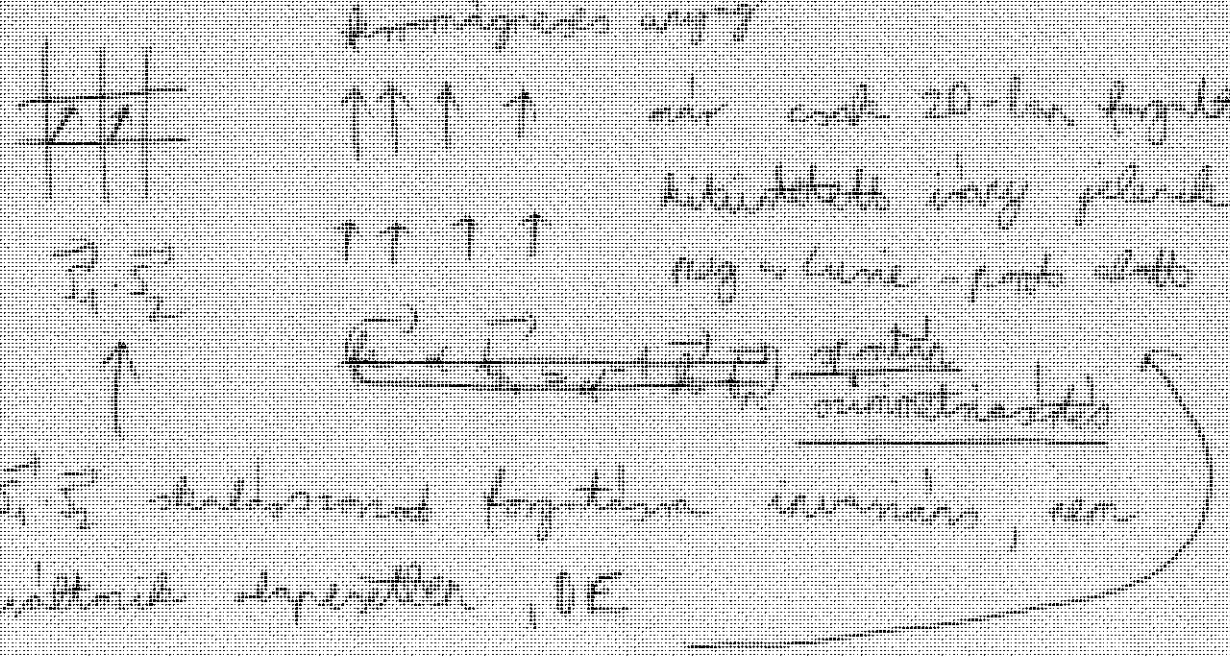
$\Rightarrow$ elég a BZ egy tartományában vizsgálnom a rsz.-t

a legeti [illegible] [illegible]

2) Kedvezőtlen [illegible]

pl. spinel kölcsönhatás

hamiltonian [illegible]



[illegible] és [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

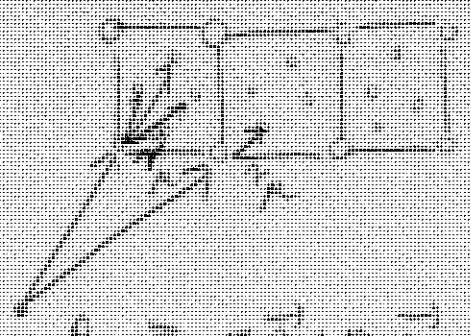
[

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]



$$\vec{r} = \vec{R}_n + \vec{r}_n + \vec{u}(n,\mu)$$

[illegible]

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

[illegible]

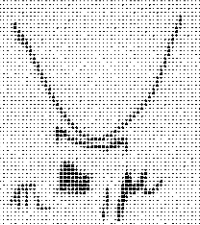
$$u_\alpha(n,\mu,t) = u_{\alpha\mu}$$

[illegible]

[illegible]

$$T = \sum_{n\mu\alpha} \frac{1}{2} M_\mu \dot{u}^2_\alpha(n,\mu) = \frac{1}{2} \sum_{n\mu\alpha} M_\mu \dot{u}^2_\alpha(n,\mu)$$

[illegible]



[illegible]

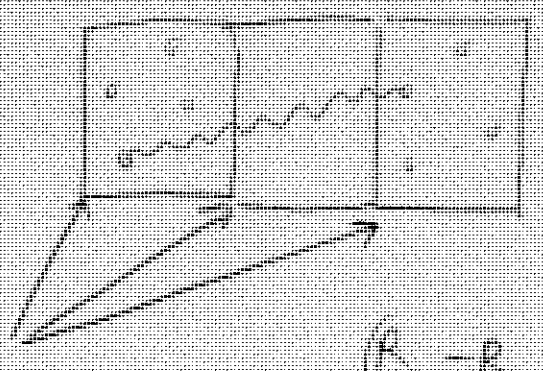
$$W = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{n\mu\alpha\beta} \Phi^{\alpha\beta}(n,\mu) u_\alpha(n,\mu) u_\beta(n,\mu) + \dots$$

[illegible]

$$F^{\mu}_{(n,m)} = -\frac{\partial L}{\partial u_\mu(n,m)} = -\sum_{n',\nu,\beta} \Phi^{\mu\nu}_{\nu\beta}(n,n')\, u_\beta(n',\nu)$$

$$\boxed{M_\mu \ddot{u}_\mu(n,\mu) = -\sum_{\nu,\beta} \Phi^{\mu\nu}_{\nu\beta}(n-n')\, u_\beta(n',\nu)}$$

amplitude



$(R_m - R_n)$ [illegible]

$(\alpha, \beta - m)$

Magnitude [illegible] magnitude [illegible]

$\Rightarrow$ (k, ω) polarization [illegible]

[illegible] [illegible] $R(\omega) = ?$

$$u_\alpha(m,\mu,t) = \frac{1}{\sqrt{NM_\mu}} \sum_q u_\alpha(q)\, e^{i(qR_m - \omega t)}$$

[illegible]

amplitude [illegible]

$$\omega^2 u_\alpha(q) = \sum_{\nu\beta} D^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(q)\, u_\beta(q) \qquad (4)$$

حيث

$$D^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(q) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \sum_{n} \Phi^{\mu\nu}_{\alpha\beta}(n-m)\, e^{-iq(R_n - R_m)}$$

مصفوفة ديناميكية

$\alpha = 1, 2, 3$ تمثل الذرات

$\mu = 1, \ldots, 3$ تمثل الاتجاهات

$(\alpha\mu) = 3p$

$(\beta\nu) = 3p$ $\Rightarrow$ D $3p \times 3p$ مصفوفة

عند حساب ω نجد مصفوفة الديناميكية

لها γ قيم $(N\omega)$ $\Rightarrow$ $N\omega$ $3p \times 3p$ مصفوفة

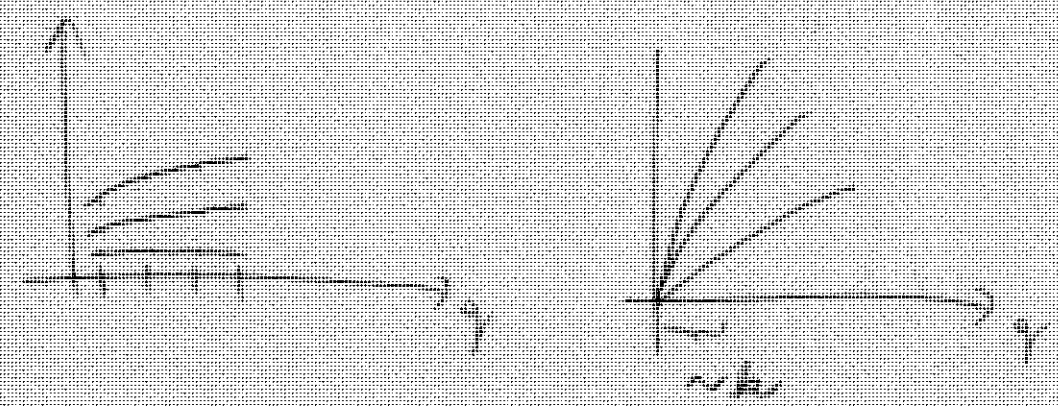
$\Rightarrow$ $N\omega$ $3Np \times 3Np$ مصفوفة الهيسيان

⑧ $\omega^2 \underline{u} = \underline{D}\,\underline{u}$ تمثل مصفوفة

لها γ قيم ω^2 $\boxed{\begin{matrix} \omega_\lambda(q) \\ (\lambda) \\ \omega_{3p}(q) \end{matrix}}$ $\Rightarrow$ مصفوفة

$\Rightarrow$ $\omega(q)$ $\Rightarrow$ $\lambda = 3p$ فرع

$$\mu_{pd}(y,h) = \sum_{\lambda} \underbrace{\frac{\mu_{\lambda}(y)}{\text{[illegible]}}}_{\text{[illegible]}} \cdot \underbrace{Q_{\lambda}(y,h)}_{\text{[illegible]}}$$



[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

<u>[illegible]</u>

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[

$$u_\alpha(m,\mu,t) = \frac{1}{\sqrt{N M_\mu}} \cdot \sum_{q,\lambda} e^{(\lambda)}_{\mu\alpha}(q) \cdot Q_\lambda(q,t) \cdot e^{iqR_m}$$

$$\dot{u}_\alpha(m,\mu,t) = \ldots \dot{Q} \ldots$$

helyettesítés a potenciál kifejtésbe

$$T_{kin} = \frac{1}{2} \sum_{q,\lambda} \dot{Q}^*_\lambda(q) \cdot \dot{Q}_\lambda(q)$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{q,\lambda} \omega_\lambda^2(q) \cdot Q^*_\lambda(q) \cdot Q_\lambda(q)$$

$$\mathcal{L} = T_{kin} - U \Rightarrow \overbrace{p_\lambda(q)}^{\text{ált. imp.}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_\lambda(q)}$$

Lagr.-fom. Hamilton-fom.

$$\Rightarrow \mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{q,\lambda} \left[|p_\lambda(q)|^2 + \omega_\lambda^2(q) |Q_\lambda(q)|^2 \right] \qquad q \to N, \quad \lambda \to 3p$$

a rs. ugyan, mint a harmonikus oszcillátor

$3p \cdot N$ kül. oszcillátor

3 مسألة

1) مسألة

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

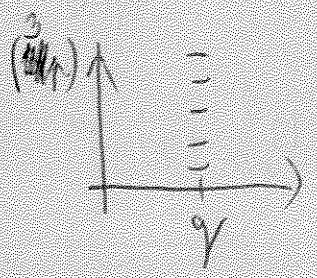
[illegible]

[illegible]

[illegible]

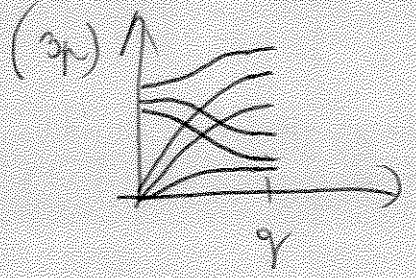
• látt. esetben nem igaz, hogy valamelyik biztos long.,
~ többi transz. lesz

• hasonlóan rögzített q-ra nem tudom, melyik
lesz optikai, és melyik akk. vagy



⇓

több q-ra kell megtárani



DE állítás: biztosan van 3 akusztikus (0-ba
menő) módus

→ magas szimm. irányra néve lehet „transzv." és
"long." irányokat elnevezni

$$u_{\mu,\alpha}(q) = \frac{1}{\sqrt{N \cdot M_\mu}} \sum_\lambda e_{\mu\alpha}^{(\lambda)}(q) \cdot Q_\lambda(q)$$

$$u_\alpha(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{N m_p}} \sum_{\mathbf{q}\nu} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \, Q_\nu(\mathbf{q}) \, e^{-i\omega_\nu(\mathbf{q})t}$$

$$\frac{\partial^2 u_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = -\frac{1}{\sqrt{N m_p}} \sum_{\mathbf{q}\nu} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \, \omega_\nu^2(\mathbf{q}) \, Q_\nu(\mathbf{q}) \, e^{-i\omega_\nu(\mathbf{q})t}$$

$$\frac{\partial^2 u_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = -\omega_\nu^2(\mathbf{q}) \, u_\alpha(\mathbf{r},t)$$

$$P_\nu(\mathbf{q}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\nu(\mathbf{q})} \qquad L = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\nu} \left[|\dot{Q}_\nu(\mathbf{q})|^2 - \omega_\nu^2(\mathbf{q}) |Q_\nu(\mathbf{q})|^2 \right]$$

$$Q_\nu(-\mathbf{q}) = Q_\nu^*(\mathbf{q})$$

$\Rightarrow$ [illegible]

[illegible]

$\Downarrow$

4) [illegible]

a) $E = E_0 + 3pVk_BT$

$\Rightarrow C_V = 3pVk_B$ [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible]

$$E = \sum_{\gamma\lambda} \hbar\omega_\lambda(q)\, n_\lambda(q) =$$

Bose-Einstein-Verteilung

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$n_\lambda(q) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda(q)} - 1}$$

$$= \sum_{\lambda q} \frac{\hbar\omega_\lambda(q)}{e^{\beta\hbar\omega(q)} - 1}$$

Bose-Einstein-Statistik

EE-Phononen

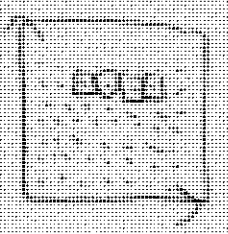
- Dispersionsrelation vorgegeben

$$\omega_\lambda(q) = c_\lambda q \qquad \omega(q) = c\, q$$

alle Moden, die long. angeregt werden, werden trans. angeregt

$$\sum_q \frac{\hbar c q}{e^{\beta c q} - 1} \Rightarrow$$

$$q = \frac{k_1}{L_1} \vec{b}_1 + \frac{k_2}{L_2} \vec{b}_2 + \frac{k_3}{L_3} \vec{b}_3$$



1 Mode pro Volumen

$$\frac{\pi^3}{V}$$ Volumen

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q\, \frac{\hbar c q}{e^{\beta c q} - 1} =$$

$$\vec{b}_1 \vec{b}_2 \vec{b}_3 = V$$ Volumen Elementarzelle

$$\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3 \Rightarrow \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3$$ Vektoren

$$= \frac{4\pi}{2\pi^3} \frac{V}{(2\pi)^3} \int q^2 dq\, \frac{\hbar c q}{e^{\beta c q} - 1} =$$

$$\beta c q := x$$

$$k_1 = 2\pi \frac{\vec{b}_2 \times \vec{b}_3}{(\vec{b}_1 \vec{b}_2 \vec{b}_3)} \Rightarrow n_1 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

$$= \frac{(kT)^3}{c^3} \frac{V}{(2\pi)^2} \int dx\, \frac{x^3}{e^x - 1}$$

$$V = n_1 n_2 n_3 \left(\frac{2\pi}{L_1}\right) \frac{1}{V} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

b) (Mag.)

$E \sim T^4$ 2D-Ion: $E \sim T^3$

$\boxed{C \sim T^3}$ 1D-Ion: $E \sim T^2$

DC-Leitung: Wärmeleitung durch Phononen (Phononen)

2) Kontinuum Limes

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \overset{QM}{\Rightarrow} \quad H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

$$[X, P] = i\hbar$$

$$[q, p] = 1 \qquad \hat{q}, \hat{p} \Rightarrow q, p$$

$$b \qquad X = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left(b + \frac{i}{m\omega} b^\dagger \right)$$

$$H = \hbar\omega \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right) \qquad b = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left(b - \frac{i}{m\omega} b^\dagger \right)$$

Mehrteilchen:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, r} \left(|P_\lambda(q)|^2 + \omega_\lambda^2(q) |Q_\lambda(q)|^2 \right) \Rightarrow$$

$$[Q_\lambda(q), P_\lambda(q)] = i\hbar$$

2 Atome:

$$[Q_{\lambda 1}, P_{\lambda 2}(q)] = i\hbar \delta_{\lambda 1} \delta_{r 2}$$

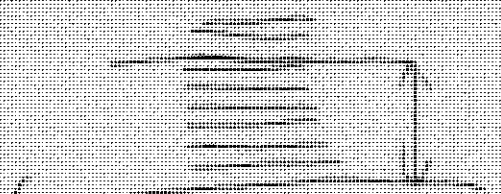
$$a_\lambda(\gamma) = \sqrt{\frac{\omega_\lambda(\gamma)}{2\hbar}}\left[Q_\lambda(\gamma) + \frac{i}{\omega_\lambda(\gamma)} P_\lambda(\gamma)\right]$$

$$a_\lambda^+(\gamma) = \sqrt{\frac{\omega_\lambda(\gamma)}{2\hbar}}\left[Q_\lambda(\gamma) - \frac{i}{\omega_\lambda(\gamma)} P_\lambda(\gamma)\right]$$

$$\boxed{H = \sum_{\lambda,\gamma} \hbar\omega_\lambda(\gamma)\left[a_\lambda^+(\gamma)\, a_\lambda(\gamma) + \frac{1}{2}\right]}$$

$$H\psi_n = E_n\psi_n$$

$$E_n = E_0 + \sum_{\gamma,\lambda} \hbar\omega_\lambda(\gamma)\left(n_\lambda(\lambda,\gamma) + \frac{1}{2}\right)$$



$\hbar\omega_\lambda(\gamma)$ $\quad 2\hbar\omega_\lambda(\gamma)$

$\hbar\omega_\lambda(\gamma_1) + \hbar\omega_\lambda(\gamma_2)$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{M\Omega_k} \sum_{\lambda,\gamma} \frac{1}{\omega_\lambda(\gamma)} \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda(\gamma)}-1} + \frac{1}{2} \right] =$$

$$= \frac{\hbar}{M\Omega_k} \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_\lambda \int d^3\gamma \, \frac{1}{\omega_\lambda(\gamma)} \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda(\gamma)}-1} + \frac{1}{2} \right]$$

ka, kw:

$$F_\lambda = \frac{1}{V} \sum_\gamma f(\omega_\lambda(\gamma)) = \int \frac{d^3\gamma}{(2\pi)^3} f(\omega_\lambda(\gamma)) = \int_\lambda d\omega \, f(\omega) \, \gamma_\lambda(\omega)$$

$$\boxed{\gamma_\lambda(\omega) = \int \frac{d^3\gamma}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_\lambda(\gamma))}$$

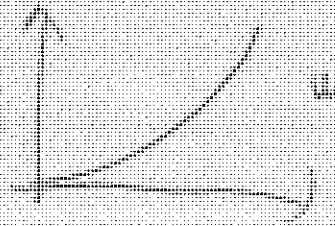
Jonkinen tulee kiinnitetä sen yksiköstä, mutta mutta, koska ω on $\omega + d\omega$ taajuuksien kuten modus ovat = lukumäärällä

$\Downarrow$

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{M\Omega_k} \sum_\lambda \int d\omega \, \frac{1}{\omega} \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} + \frac{1}{2} \right] \gamma_\lambda(\omega)}$$

$$\gamma_\lambda(\omega) = \int \frac{d^3\gamma}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_\lambda(\gamma)) =$$

$$= \int \frac{d^3\gamma}{(2\pi)^3} \delta(\omega - c_\lambda \gamma) = \frac{1}{c_\lambda^3} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \omega^2 \quad 3D\text{-tap.}$$



$\Downarrow$

$$\langle u^2 \rangle = \sum \int d\omega \, \frac{1}{\omega} \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega^2$$

3D-harm.: $\langle u^2 \rangle \sim T^2$

2D-harm.: $g(\omega) \sim \omega$ (1D-harm. $g(\omega) \sim \omega^{-1}$)

1D-harm.: $g(\omega)$ const.

$\Downarrow$

1D-harm.:

$$\langle u^2 \rangle \sim \int d\omega \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \frac{1}{2} \right]$$

tunpl. (log) $\exists$ digm. regn., log $\hbar\omega < k_B T$

$$\Rightarrow \underbrace{e^{\beta\hbar\omega} - 1}_{\approx 1 + \beta\hbar\omega} \approx \beta\hbar\omega$$

$$\Rightarrow \langle u^2 \rangle \sim \int d\omega \, \frac{1}{\beta\hbar\omega} = \int_0^\infty d\omega \, \frac{k_B T}{\hbar\omega} \rightarrow \underline{\text{divergent!}}$$

$\Rightarrow$ es handelt sich um, mit dem mit dem mit den Schwingungen um log. „Intervall" – Anzahl typ. log. Bin. – Zw. $\Rightarrow$ regulärer Anteil

• 2.0-Lag.:

[illegible]

[illegible] $\int dx\, \mathcal{L}_{int} \to \frac{1}{\text{[illegible]}} \to \text{[illegible]}$

[illegible] [illegible]

• 1.0-Lag.:

[illegible] $\int dx\, \mathcal{L}_{int} \Rightarrow \sigma \langle x \rangle$, [illegible] OK-[illegible]!

$\Rightarrow$ [illegible] $\exists$ [illegible] 1D [illegible]!

– [illegible] $\langle x \rangle$ [illegible] – [illegible], [illegible]

[illegible]!

2) [illegible] [illegible] [illegible], [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible]!

$$W = W_0 + \dots + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \varphi^{\alpha\gamma}_{\alpha\beta}(m_\alpha, m_\beta)\, u^\alpha(k)\, u^\gamma(k) +$$

$$+ \varphi^{\alpha\gamma\pi}_{\alpha\beta\gamma}(m_\alpha, m_\beta, m_\gamma)\, u^\alpha(k)\, u^\beta(k)\, u^\gamma(k) + \dots$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \sum \varphi^{\alpha\beta\gamma}_{\alpha\beta\gamma}\, u\, u\, u + \dots$$ [illegible] [illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

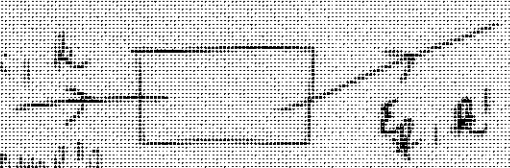
[illegible]

[illegible]

4) [illegible]

[illegible] $u_1(r), \tau_1(r)$

a) [illegible]



E_1 (Anfangs) $\to E_4$

$(E_1, k)\ (E_2, k) \to (E_3, k')\ (E_4, k)$

$n_\lambda(r)$: λ [illegible] [illegible]

(1): $E_1 = \sum_{\lambda,r} \hbar\omega_\lambda(r)\left(\tilde{n}_\lambda(r) + \frac{1}{2}\right)$

(2): $E_4 = \sum_{\lambda,r} \hbar\omega_\lambda(r)\left(n_\lambda(r) + \frac{1}{2}\right)$

[illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible]

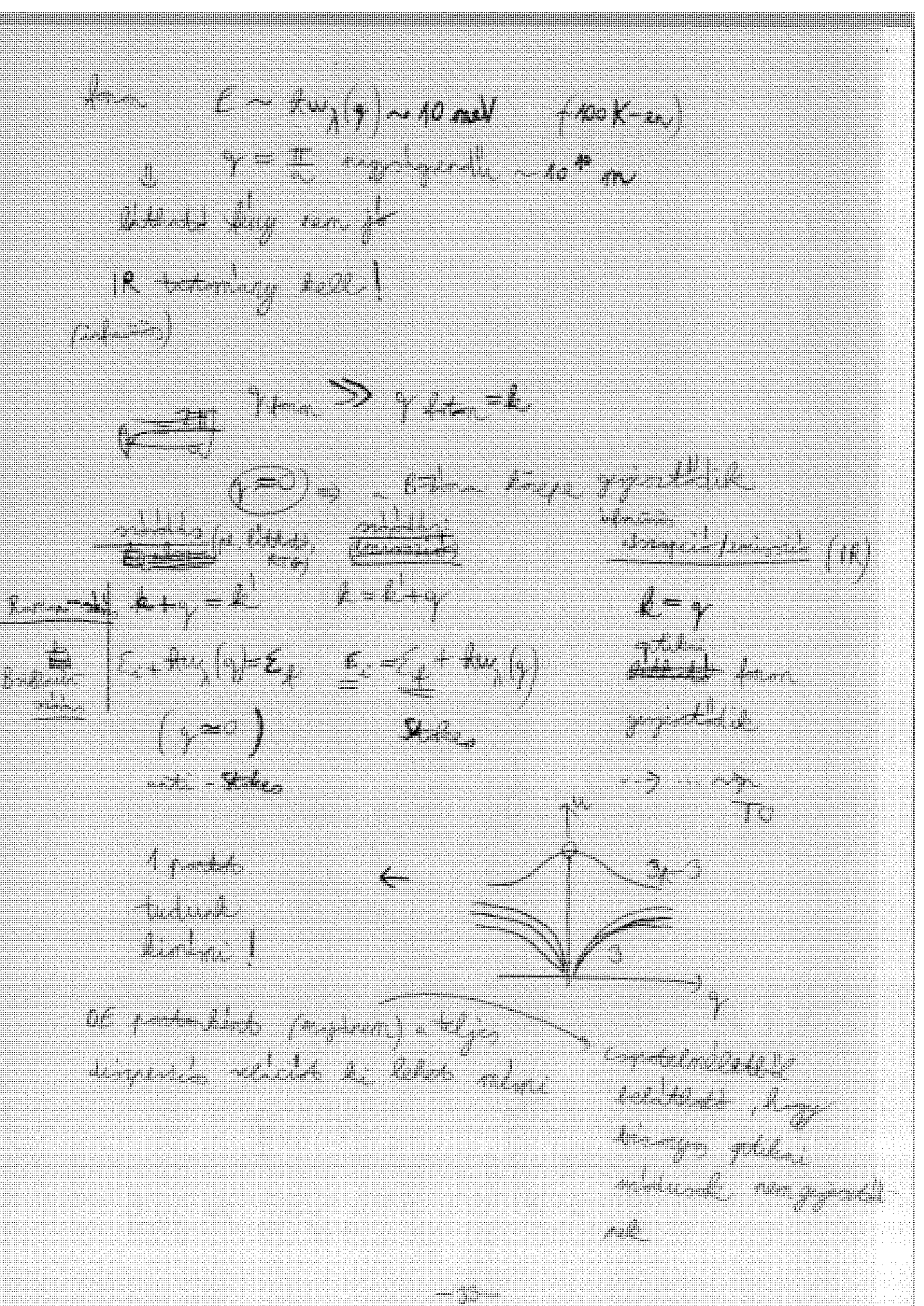
[illegible] $k \approx 7$ [illegible] [illegible]

[illegible] $E \approx 1.5 - 2.5\,eV$

$\lambda \approx 400 - 800\,nm$

$\nu = \frac{2\pi}{\lambda} \approx 10^7\,m^{-1}$

[illegible]



[illegible]

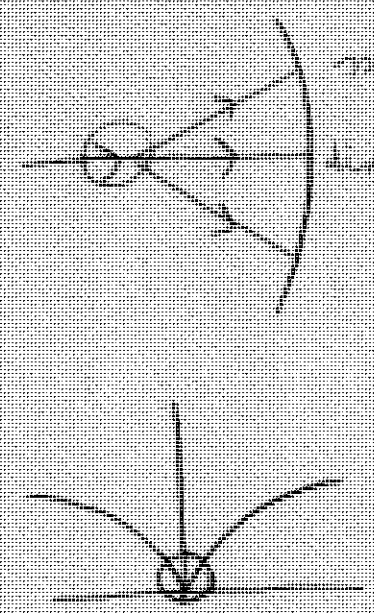
- [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

(Fr. [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible])

- [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [



[illegible] $\Rightarrow$ [illegible]

[illegible] $\Rightarrow$ [illegible]

[illegible] $\Rightarrow$ [illegible]

$E_1 \frac{\hbar^2}{2m_1}$ → [illegible] → $\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2}$ $d\Omega_2$ $\quad E = \frac{\hbar^2}{2m_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}$ (illegible)

$|1\rangle, E_1 \to |2\rangle, E_2 \qquad E_1 - E_2 = E_2 - E_1$

$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \qquad E_1 + E_1 = E_2 + E_2$

$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$

$E_1 \; E_2$ [illegible]

$$W_{|1\rangle \to |2\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle 2|\mathcal{H}_{int}|1\rangle|^2 \delta(E - E_2 + E_1)$$

$\rho(E) = ? \quad \leftarrow \rho(E)\, dE\, d\Omega$

$$\overbrace{k^2\, dk \cdot \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}^{d\Omega} = k^2 \frac{m}{\hbar^2}\, dE\, d\Omega$$

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

$\frac{V}{(2\pi)^3}$

$\Rightarrow \rho(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{m k}{\hbar^2}\, dE\, d\Omega$

$$dT = (\ldots) K \quad \langle 2|^2 \delta(E - E_2 + E_1)\, dE\, d\Omega$$

$$\frac{d\sigma}{dE\, d\Omega} = (\ldots) |\langle\ \rangle|^2 \delta(E - E_2 + E_1)$$

[illegible] $d\Omega$ [illegible] probability (α_2, β_2)

[illegible] [illegible]

$$\langle \alpha, \mathbf{k} | K_{int} | \mathbf{k}, \alpha \rangle =$$

$$= \int dr\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \alpha | \sum_n U(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) | \alpha \rangle =$$

$$= \sum_n \int dr\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)} \langle \alpha | U(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) | \alpha \rangle e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_n} =$$

$$= \underbrace{N\, U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}_{\text{Fourier transform}} \langle \alpha | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle =$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} |W_{\mathbf{k}}|^2 \langle \alpha | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle \langle \alpha | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle = |\langle \mathbf{k}, \alpha | \mathbf{k}', \alpha \rangle|^2$$

$$W_{\mathbf{k},\alpha \to \mathbf{k}',\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} |W_{\mathbf{k}}|^2 \langle \alpha | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle \langle \alpha | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle\, \delta(E - E_{\mathbf{k}} + \varepsilon)$$

$$\delta(E - E_{\mathbf{k}} + \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E - E_{\mathbf{k}} + \varepsilon)t/\hbar}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E - E_{\mathbf{k}} + \varepsilon)t/\hbar} |W_{\mathbf{k}}|^2 \langle \alpha | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle \langle \alpha | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \alpha \rangle$$

$$e^{iE_{\mathbf{k}}t/\hbar}$$

$$= \sum_{k_1} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{i\omega t} \langle 0| e^{-ik_1 x} e^{-i\omega H} |k_1\rangle\langle 0| e^{ik_1 x}|0\rangle$$

$$\sum_{k_1} \frac{(\ldots)|k_1|}{\ldots} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{i\omega t} \langle 0| e^{-ik_1 x} |k_1\rangle\langle k_1| e^{ik_1 x}|0\rangle = W$$

[illegible] energy eigenstates

$\langle 0|$ [illegible] vacuum

[illegible] eigenstates

[illegible] k_1 [illegible] $\langle 0|$-[illegible]

$$\sum_{k_1} Z_{k_1} \langle 0|\ldots|0\rangle$$

[illegible] multiparticle [illegible]

[illegible] the [illegible]

[illegible] eigenstates [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] $\sum_k |k\rangle\langle k| = 1$

$$W = \sum_k \langle 0|\ldots|0\rangle \ldots \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{i\omega t} \langle 0| e^{-ik_1 x} e^{ik_1 x}|0\rangle =$$

$$= (\ldots)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{ikx} \sum_{n} \langle e^{-ik_n(t)} \, e^{ik_n} \rangle$$

$$\sum_n \langle n | O | n \rangle \to \text{[illegible]}$$

$$\sum_n e^{-ik_n(t)} = \int d\sigma \, e^{-ik\sigma} \underbrace{\sum_n \delta(\sigma - \sigma_n(t))}_{\rho(\sigma)} = \int d\sigma \, e^{-ik\sigma} \rho(\sigma, t)$$

$w = \text{[illegible]}$ [illegible]

$$\boxed{w = (\ldots)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{ikx} \left\langle \frac{1}{\text{[illegible]}} \int d\sigma_1 \, d\sigma_2 \, e^{-ik(\sigma_1 - \sigma_2)} \rho(\sigma_1, t) \rho(\sigma_2, t) \right\rangle}$$

[illegible] $\to$ [illegible]

$$\frac{dC}{dx\,dt} = \text{[illegible]} \quad \left(k = \frac{E - E'}{\text{[illegible]}}\right) \quad \frac{\text{[illegible]}}{\text{[illegible]}}$$

[illegible] [illegible], [illegible] (E) [illegible] (K) [illegible] [illegible]

(spectral [illegible] [illegible] spin-dependent [illegible] [illegible])

$$\sigma_m = \xi_m + u_m(t)$$

$$\sigma_n = \xi_n + u_n \qquad \langle e^{-ik_m(t)} \, e^{ik_n} \rangle =$$

$$\bar{\sigma} \langle e^{-ik\xi_m} e^{-ik u_m(t)} \, e^{ik\xi_n} e^{ik u_n} \rangle =$$

$$\sum_{m,n} e^{-iK(R_m-R_n)} \langle e^{-iKu_m(t)} e^{iKu_n} \rangle$$

$\downarrow$

ez akkor ad járulékot, ha

egyébként kiesik ki $\rightarrow$

$\underline{K} = \underline{G}$ (reciprokrács vektor)

Bragg-feltétel

$$\vec{u}_m(t) = \sum_{\lambda,q} \sqrt{\frac{\hbar}{2MNw_\lambda(q)}} \Big[\overset{\text{pol. vektor}}{\vec{e}(\lambda)} a_\lambda(q) e^{iqR_m} e^{-iw_\lambda(q)t} +$$

$u_n = \ldots$ $\qquad + \text{hermitikus konj.} \Big]$

mert:

$$e^A e^B \neq e^{A+B}, \text{ hanem } e^A \cdot e^B = e^{A+B} \cdot \underbrace{e^{\underbrace{\frac{1}{2}[A,B]}_{\text{szám}}}}_{\text{faktor}}$$

ha $[A,B] \neq 0$

$$\langle e^{-iK(u_m(t)-u_n)} \rangle$$

mert $\langle e^{iC} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle C^2 \rangle}$

— [illegible] $\boxed{\epsilon = 0}$ [illegible]

(Bragg-[illegible])

• $\boxed{K = G}$ [illegible] [illegible] Bragg [illegible] [illegible]

(ads) [illegible] (Fabelle [illegible] phase [illegible])

$\Rightarrow D = e^{-2W}$ Debye-Waller factor

↓

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] (relevant [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible])

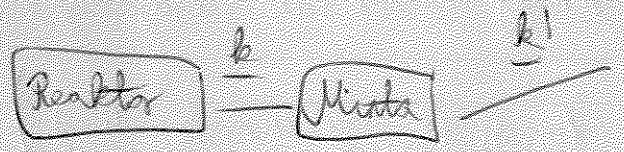
• [illegible] $\underline{K} = \underline{k} - \underline{k'} = \underline{G} \pm \underline{q}$ [illegible] [illegible]

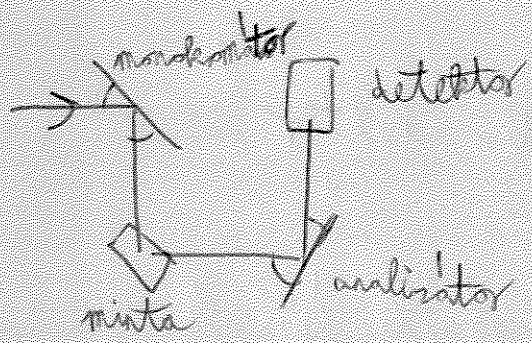
([illegible] [illegible])

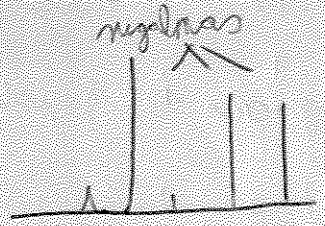
$\boxed{\epsilon = \pm \omega_q(q)}$

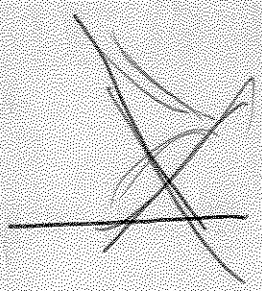
• [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

5. óra









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

$\Delta W_\lambda(q)$ energia szél.

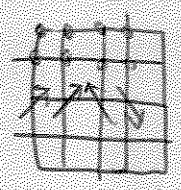
$\underline{k} - \underline{k}' = G \pm q$

$\Uparrow$

Ugalmatlan

(karakterisztikus)

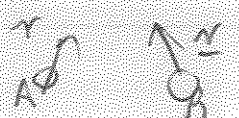
Mágnesség



minden csúcson van egy atom, aminek van mágneses momentuma

$\vec{S}_\lambda$ ennek lehet eredőt beállítani: egyszerűen képesek hogy álljanak be kölcsönhatási kicserélődésből adódik.

kicserélődés:



$$\left(\psi_A(r_1)\psi_B(r_2) \pm \psi_B(r_1)\psi_A(r_2)\right)\left[|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 \mp |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\right]$$

$\psi_B(r_1)\psi_A(r_2)$

$|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$

$|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$

[illegible]

[illegible]

$$\int \psi_A^*(r_1)\,\psi_B^*(r_2)\,K\,\psi_A(r_2)\,\psi_B(r_1)\,d\tau_1\,d\tau_2$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

a singlett, triplett áll.-t le tudom írni egy ilyen eff. kam.-operátorral.

$$\boxed{\mathcal{H} = -\sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j}$$ Heisenberg-modell

~~Kérdés~~ Megjegyzések:

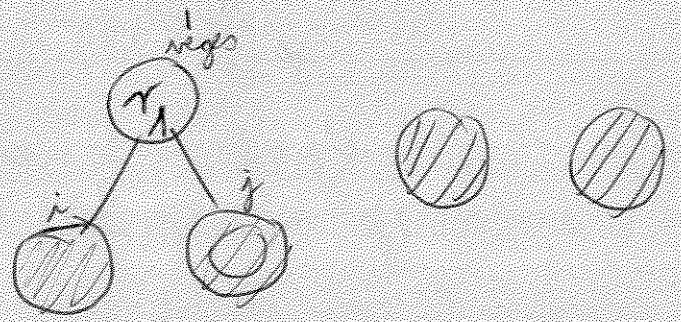
1. nik ~~testben~~ nem csak izolálok, hanem mozgékony (itineráns) e^--ok is vannak

⇓

ezek szerepet játszanak a mágességben?

Legtöbb esetben nem, de van ahol nem ~~lehetlenek~~ el ~~tűnik~~

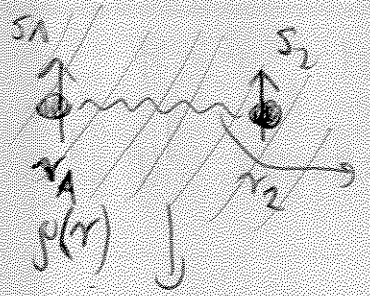
2.



kicserélődés csak akkor lehet, ha a hlv.-ek <u>átfednek</u>.
(de ha átfednek, akkor csak akkor kapunk vége jónak, ha mindkettő vége)

Mi van, ha a sz.-ben nincs átfedés?

a)



Mi visszi be az információt (kk.-t)?

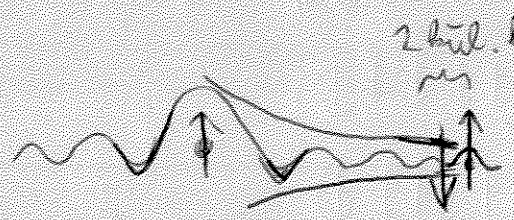
van egy delok. e^- sz. (pl. vas)

ha nem lenne spin, az körül homogén lenne.

$\rho(r) \Rightarrow \rho_\uparrow(r) + \rho_\downarrow(r)$ <u>a spin polarizálja a hőtér e^- sz.-t!</u>

$\Rightarrow \rho_\uparrow(r) \neq \rho_\downarrow(r)$ ha van egy jól lokalizált mágn. ~~momentum~~

$\rho_\uparrow - \rho_\downarrow = \sigma(r)$ spinsűrűség

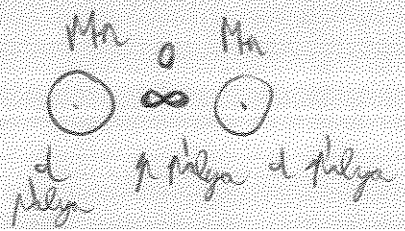


$\sigma(r) \sim \underbrace{\frac{1}{r^3}}_{\text{lecsengő ampl.}} \cdot \underbrace{\cos(\ldots r)}_{\text{oszcillálás}}$

RKKY-kk.

attól függően, hogy a 2 lokalizált spin <u>milyen messze</u> van egymástól, lehet ferromágneses vagy antiFM csatolás.

b) Mi van, ha magányos e^--k szórnak?



Mn^{2+} $3d^5$

[illegible]

[illegible]

Na
O
Na

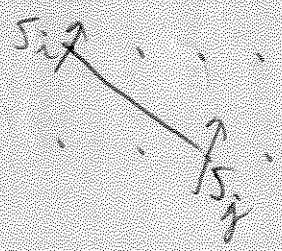
[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$\boxed{\mathcal{H} = -\sum_{ij} J_{ij}\, \vec{S}_i \vec{S}_j}$$



– feltételezések:

- $J_{ij} > 0$

- csak az első szomszédok hatnak kölcsön (láttuk, hogy direkt vagy indirekt kölcsönhatás kell a kl.-hez)

– legegyszerűbb állapotok:

$$\begin{matrix} \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \\ \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \end{matrix} \qquad \boxed{\begin{matrix} \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \\ \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \end{matrix}}$$

$$\begin{matrix} \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \\ \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \end{matrix}$$

az alapállapot sokszorosan degenerált

$\Downarrow$

egyszerűbb, ha valamilyen külső térrel beállítjuk a spineket egy kiválasztott iránnyal, majd kikapcsolva a teret ennek az időfejlődését nézzük

($M = g\mu_B S$

$g = -2$ e-ra

$\Downarrow$

$\vec{M} \sim -\vec{S}$

érdemes választani a $\downarrow\downarrow\downarrow$ alapáll.-ot, mert ilyenkor M maximális)

$$S_i^2 |0\rangle = -S|0\rangle$$

$$E = -\zeta_y^2 \zeta_y^2 - E = -\frac{1}{2m} \zeta_y^2 \zeta_y^2 \psi_n$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} = E(\vec{r}) \quad \psi_n = \text{eigenfunction}$$

(non-degenerate eigenfunction)

n — level

ψ_n — 2nd

higher — higher — an lic, hence permitted

hence the — E

Solution

non permitted symbol symbol

ψ_n with

$\psi_{\text{origin}} \neq$ the allowed bands in

monitoring spin or orbital

Lecture notes

$$K = -\zeta_y^2 \zeta_y \left(\zeta_1 (\zeta_x^2 \zeta_y + \zeta_y^2) + \zeta_x^2 \zeta_y^2 \right)$$

$$\zeta_x^2 \zeta_y = \zeta_1 (\zeta_x^2 \zeta_y + \zeta_x^2 \zeta_y) + \zeta_y^2$$

$$\zeta_x^2 = \zeta_1 (\zeta_x^2 \zeta_y \rightarrow$$

Lecture notes

second order Hamiltonian ζ_y

$\zeta_1 \quad \zeta_2 \quad \zeta_1$

ψ_n

(Hence

symbol

symbol and

Lecture)

- $S_l^+|0\rangle$ $\qquad |0\rangle \qquad \downarrow\downarrow\downarrow$

- $$\boxed{E_0 = -\sum_{ij} J_{ij} \cdot S^2}$$ alapállapot

  csak a z komponens

- $\downarrow\downarrow \ldots \downarrow\uparrow\downarrow \ldots \downarrow\downarrow \qquad \downarrow\downarrow \ldots \uparrow\downarrow\downarrow \ldots \downarrow\downarrow$

  $j=l$. rácspont $\qquad$ i. rácspont

  ez nem jó sajátállapot önmagában → lin. komb. kell

$$\Psi^{(0)} = \sum_l \underbrace{f(l)}_{\text{együttható}} \cdot S_l^+|0\rangle =$$

Bloch-tétel miatt (rácsperiodikus a Ham.-op.!)

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2|N|}} \sum_l e^{ikR_l} S_l^+\right)|0\rangle$$

$(N-1)$ $\downarrow$ $\qquad$ de figyelni kell $i=l$, $j=l-x$ (+jánulk)

$\uparrow$ (l. ~~helyen~~ cellában) $\qquad$ $i \neq j$ – x nincs külön jánulk

$\vdots$

(Számolás után:)

$$E = E_0 + 2S \sum_{ij} J_{ij} \cdot \left[1 - e^{ik(R_j - R_i)}\right]$$

$$\sum_\delta \left(1 - e^{i\delta}\right) \longrightarrow e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a}$$

sorfejtés

$$1 - \cancel{1}\, k_x a - \frac{1}{2}(k_x a)^2 + \ldots \qquad k_x^2,\ k_y^2,\ k_z^2 \to k^2$$

$$\Rightarrow \sum_{\ell}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \ldots \quad \text{[illegible]}$$

$$\frac{\hbar\omega_\ell}{2} = D\,\ell^2$$

[illegible] and a spin-dependent potential

[illegible] spin-dependent [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] magnetic [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

$$\psi^{(0)} = \underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_{\ell} e^{i\ell k_z}\, \xi_\ell\right)}_{=\psi_k^{+}} |0\rangle \quad \text{[illegible]}$$

$$\psi_k^{+} = \frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_{\ell} e^{i\ell k_z}\, \xi_\ell^{+}$$

$$\psi_k^{-} = \frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_{\ell} e^{i\ell k_z}\, \xi_\ell^{-}$$

$$G_{\ell\ell'}(\tau) = \frac{1}{2N}\sum_{k} e^{ik(\ell-\ell')}\left[\xi_{\ell'}^{-}, \xi_{\ell}^{+}\right] = \frac{1}{2N}\sum_{k} e^{ik(\ell-\ell')}\, \delta_{\ell\ell'} = \delta_{\ell\ell'}$$

$$\lim_{\substack{k<\xi \\ (\text{[illegible]})}} \quad \text{[illegible]}$$

$$\text{[illegible]} \quad \xi_k = \xi \quad (\text{[illegible]})$$

$$\boxed{\begin{aligned} a_2^{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, \xi_2^{+} \\ a_1^{-} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, \xi_2^{-} \end{aligned}}$$

$$\xi_1^{+} = \sqrt{2}\, a_2^{+}$$

$$\xi_1^{-} = \sqrt{2}\, a_2^{-}$$

$$\xi_2^{\pm} = -\xi_1 \pm \underbrace{\xi_2^{+} + \xi_2^{-}}_{\text{Hydrogen}} \quad \text{[illegible]}$$

$$\text{[illegible]}$$

$$\text{[illegible]}$$

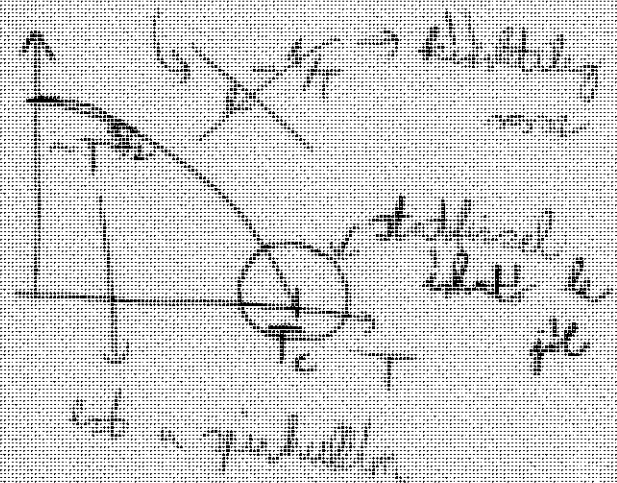
$$\mathcal{H} = \frac{\xi_2}{4} \left[\left(\xi_1^{+} \xi_1^{-} + \xi_2^{+} \xi_2^{-} \right) + \xi_1^{2} \xi_2^{2} \right] =$$

$$\boxed{\mathcal{H} = \left[E + \underbrace{Z}_{\text{[illegible]}} \right]} \rightarrow \text{[illegible]}$$

$$\text{[illegible]} \quad \text{Kw}_{\text{[illegible]}} = 2.5 \sum_{n,l} \mathcal{F}_{l} \left(1 - e^{-\text{[illegible]}} \right)$$

$$\frac{1}{2}\langle S^2\rangle = -NS + \frac{1}{2}\langle S^2\rangle = -NS + \frac{1}{2}\langle S^2\rangle$$

(Landau theory)



$\boxed{\text{order}} =$ [illegible]

[illegible]

– [illegible]

[illegible]

[illegible]

[

1

[illegible]

b

[illegible]

c 1

a) [illegible]

$$\boxed{x = \frac{7}{2}, \ \frac{15}{2}} \quad x_1 > 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = \frac{7}{2} \\ x_2 = \frac{15}{2} \end{array} \right.$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$x = \sum_{i} x_i(t) \xi_i + \text{[illegible]}$$

$$x_1 = -5 + x_1^2 - x_2$$

$$x_2 = \sqrt{25} + (1 - \frac{x_1}{2})^2 \quad \text{[illegible]}$$

$$x_1 = \sqrt{25}\left(1 - \frac{x_1}{2}\right)^2 \quad \text{[illegible]}$$

1) [illegible] $\sum_i T_{ai} \leq 25$, [illegible]

$\sum_i T_{ai}$ [illegible]

$\Rightarrow \boxed{\sum_i T_{ai} \leq 25}$

[illegible] (Hamiltonian [illegible])

with

2) [illegible] [illegible], [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

$$H = H_0 + \sum_{\text{[illegible]}} \underbrace{[illegible]}_{\text{sep. [illegible]}}$$

$\rightarrow$ [illegible] sep.

$\rightarrow$ [illegible] [illegible]

(with sep.-sep. [illegible])

$\rightarrow$ [illegible] sep. [illegible]

$$H = -\sum_j \exists_j \left[\tfrac{1}{2}(S^+ S^- + S^- S^+) + S^z S^z \right]$$

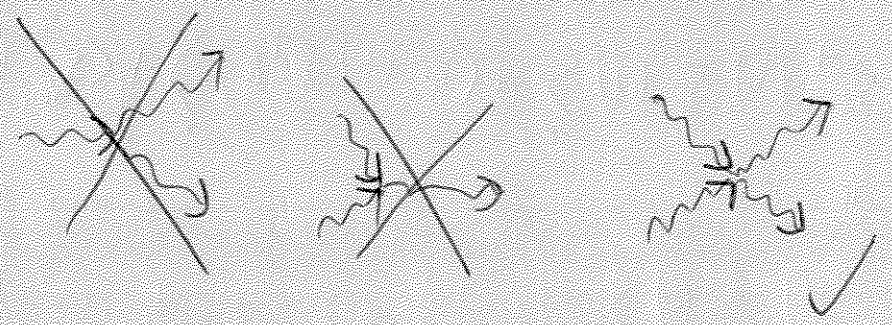
$$S_{tot}^z = \sum_i S_i^z \qquad [H, S_{tot}^z] = 0$$

$\Rightarrow$ [illegible] sep. [illegible] [illegible], [illegible]

magrendszám megmarad!

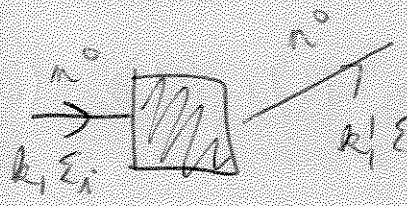
(a pinhullám ~~ms~~ gerjesztés megváltoztatja a a spinviszonyt (a^+, a) ⇒ csak olyan gerj. lehet, ahol a —"— megmarad)

⇒



3) <u>Hogyan lehet magrendszerben mérni?</u>

pl. <u>n° szórás</u>: van spinje



⇓

Mert a n° nem az atommagal, hanem a mágn. momentumot hordozó e^- felhővel hat kölcsön!

Van Hove-formula (fonon, e^--ra) ahol $K = k - k'$ $\hbar\omega = \varepsilon$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} \Rightarrow \langle \rho(r,t), \rho(0,0) \rangle_{FT} = S(K,\omega)$$

FT: Fourier-transf

FT itt: $r \to K$, $t \to \omega$ (sűr.-sűr. korreláció kv. Fourier transf.ja ≡ szerkezeti tényező)

$$\Rightarrow \langle \vec{S}(q,t)\, \vec{S}(0,0) \rangle_{FT} = \langle S_z^z(t)\, S_z^z(0) \rangle_{FT} =$$

$$\left(S^z = S^z_+ + S^z_- \right)$$

$$= \langle S_+^z(t)\, S_-^z(0) \rangle_{FT} + \langle S_-^z(t)\, S_+^z(0) \rangle_{FT} + \langle S_z^z(t)\, S_z^z(0) \rangle_{FT}$$

$$\Downarrow$$

$$\left.\begin{matrix} \langle a_+^\dagger(t)\, a_-(0) \rangle_{FT} \\ \langle a_-(t)\, a_+^\dagger(0) \rangle_{FT} \end{matrix}\right\}$$

$$\Rightarrow \sum_{k} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \int dt\, e^{i\omega t} \left[\langle a_\gamma^\dagger(t)\, a_\gamma(0) \rangle + \langle a_\gamma(t)\, a_\gamma^\dagger(0) \rangle \right] =$$

$$a_\gamma^\dagger(t) = e^{iHt}\, a_\gamma^\dagger\, e^{-iHt} = e^{i\omega t}\, a_\gamma^\dagger$$

$$= \sum_{k} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \int dt\, e^{i(\omega + \omega_\gamma)t} \langle a_\gamma^\dagger a_\gamma \rangle + \ldots$$

$$\Rightarrow \boxed{k = k' + q} \qquad \boxed{\varepsilon_k = \varepsilon_{k'} - \hbar\omega}$$

$$k - k' + q = 0 \qquad \varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + \hbar\omega_q = 0$$

$$K + q = 0 \qquad \varepsilon + \hbar\omega_q = 0$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

4) [illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$\frac{T_{B_1}}{T_{B_2}} = -\zeta + \frac{T_{B_1}}{T_{B_2}} \quad \text{(mechanical } \zeta \text{ = speed ratio)}$$

$$T_{B_1} = \sqrt{2}\, T_{B_2} \left(1 - \frac{\zeta}{2}\right)^{1/2}$$

$$T_{B_1} = \sqrt{2}\, \left[\ \right]^{1/2}$$

In mode where speed be reduce linearly to ζ (we neglect here slight ζ dissipation) ζ can then be calculated

$$T_A = T - T_{B_1} \quad \text{← torque applied to wheel}$$

$$T_A = \sqrt{2}\, \left[\ \right]^{1/2} \quad \text{← torque}$$

$$T_A = \sqrt{2}\, \zeta^{1/2} \left(1 - \frac{\zeta}{2}\right)^{1/2}$$

torque not changed

$$K = -\frac{\zeta}{2} \exists \frac{T_{B_1} T_{B_2}}{\zeta} = -\frac{\zeta}{2} \left[\frac{T_{B_1}}{\zeta} + T_{B_2}\right] + \frac{T_{B_1} T_{B_2}}{\zeta}$$

absorbed in wheel (whole system)

$$+ \frac{T_{B_1} T_{B_2}}{\zeta} = \frac{T_{B_1} T_{B_2}}{\zeta}$$

$$= -\frac{1}{4p}\left[\left(\frac{1}{2}K_{-k}\,\xi_k + \xi_{-k}\,\frac{1}{2}K_k\right) + \left(\frac{1}{2}\xi_{-k} + \xi_k\,\frac{1}{2}K_{-k}\right)\right] =$$

$$\xi_k = \frac{1}{N}\sum_{\ell} e^{i\ell k}\,\xi_\ell \qquad K_k = \ldots$$

$$\xi_k^{+} = \frac{1}{N}\sum_{\ell} e^{-i\ell k}\,\xi_\ell^{+} \qquad K_k^{+} = \ldots$$

$$\Rightarrow X = (\quad) - 2\xi_k + \sum_k \Big[\underbrace{K_k^{+}\xi_k + \xi_k^{+}K_k + \xi_k\left(K_k\xi_k^{+} + \xi_k^{+}\right)}_{\text{[illegible]}}\Big]$$

[illegible]

$$\xi_k \quad K_k \quad \text{[illegible]}$$

$$\xi_k^{+} \quad K_k \quad \text{[illegible]}$$

$$\Rightarrow \quad \xi_k = \alpha_k\,\eta_k - \beta_k\,\eta_k^{+} \qquad \alpha_k, \beta_k \in \mathbb{R}$$

$$\xi_k^{+} = \alpha_k\,\eta_k^{+} - \beta_k\,\eta_k$$

$$K_k = \alpha_k\,\eta_k - \beta_k\,\eta_k^{+}$$

$$K_k^{+} = \alpha_k\,\eta_k^{+} - \beta_k\,\eta_k$$

[illegible]

= [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

$$a_k^+ a_k \quad \beta_k^+ \beta_k \quad \text{[illegible]} \quad \text{[illegible]}$$

$$(a_k, a_k^+) = \delta_{kk'} = \boxed{u_k^2 - v_k^2 = 1} \quad \text{[illegible]}$$

$$\text{I}$$

$$(\beta_k, \beta_k^+) = 1$$

$$(a_k, \beta_k^+) = 1$$

$$\text{[illegible]}$$

$$a_k = u_k \alpha_k + v_k \beta_k^+$$

$$a_k^+ = u_k \alpha_k^+ + v_k \beta_k$$

$$\Rightarrow a_k^+ a_k = u_k^2 \alpha_k^+ \alpha_k + v_k^2 \underbrace{\beta_k \beta_k^+} + \underline{u_k v_k \alpha_k^+ \beta_k^+} + \underline{u_k v_k \alpha_k \beta_k}$$

$$\beta_k^+ \beta_k = \dots = \beta_k \beta_k + 1$$

— [illegible]

$$\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \text{[illegible]}$$

$$\boxed{2 u_k v_k + v_k (v_k^2 + v_k^2) = 0} \quad \text{II}$$

$$\text{I, II} \rightarrow u_k^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k}} + 1\right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k}} - 1\right)$$

$$\boxed{\mathcal{H} = (\quad) + \sum_k \hbar\omega_k \left(\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k + 1\right)}$$

ahol $\hbar\omega_k = 2|J|z S \sqrt{1-\gamma_k^2}$ <u>mindkét módusban</u>

van 0 pont rezgés

- 2 módus
- van 0 nullponti rezgés
- fenomológiás $1-\gamma_k^2$ jelent meg

anti —"— $\sqrt{1-\gamma_k^2}$ —"— ← az inter transzl. miatt

$$\gamma_k = \frac{1}{z}\sum_\delta e^{ik\delta} = 1-(k^2)$$

$$\Rightarrow \sqrt{1-\gamma_k^2} \sim |k|$$

$\hbar\omega_k \sim |k|$ <u>lineáris diszperzió</u>

↓

Goldstone-bozon: van egy folytonos forgatással szemben folytonos szimm. kezdetben, ami sérül

⇒ megjelennek alacsony energiás, gap nélküli bozonok

transzl. szimm. ⇒ fonon

forgatási szimm. ⇒ magnon

c) [illegible] $(T=0)$

$$\left.\begin{array}{l} S_i^z = S \\ S_j^z = -S \end{array}\right\} \text{ [illegible]}$$

$$\text{ac} \quad K = \left(S_i^z S_j^z + S_i^x S_j^x\right) + S_i^z S_j^z$$

$(S,-S)$ [illegible] $(S-1,-(S-1))$ [illegible]

$\Downarrow$

$$\frac{\text{[illegible]}}{\text{[illegible]}}\left(\begin{array}{cccc} \uparrow & \downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{array}\right) \text{ [illegible] } \left(\begin{array}{c} \text{[illegible] hyper. [illegible]} \\ \text{[illegible] [illegible]} \\ \text{(non [illegible])} \end{array}\right)$$

$$\langle S_i^z \rangle = S - \langle n_i \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_i \langle t_i \rangle =$$

$$= S - \frac{1}{N} \sum_i \left[\underbrace{\underbrace{\mathbf{k}^2}_{=0} \langle a_{\mathbf{k}} \rangle}_{\text{[illegible]}} + v_{\mathbf{k}}^2 \underbrace{\langle \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle}_{0} \right] =$$

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = 1$$

$$\langle S_i^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \qquad v_{\mathbf{k}}^2 = \left[\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1\right] \frac{1}{2}$$

$$= S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1\right) = \qquad \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}}$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$\langle S^z_{r_i}\rangle = S - \frac{2}{N}\sum_k \left(u_k^2+v_k^2\right)\frac{1}{e^{\beta\Delta k}-1}$$

Δk ~ magnon energiája!

Kitérés: $T\neq 0$ ferromágnesnél

$$S-\langle a_i^+ a_i\rangle \Rightarrow S-\frac{1}{N}\sum_k \langle a_k^+ a_k\rangle = S-\frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{e^{\beta\Delta k^2}-1} =$$

$$= S - \frac{V}{(2\pi)^3}\cdot\frac{1}{N}\int d^3k\,\frac{1}{e^{\beta\Delta k^2}-1}$$

itt $\boxed{\Delta k^2}$ négyzetes a disp. reláció!

- 3D:

$$\langle S^z_{r_i}\rangle = S - \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{1}{N}\int\frac{k^2\,dk\cdot 4\pi}{k^2} \rightarrow$$ eltűnik a mz. $T\neq 0$-nál

- 2D:

$$\int\frac{k\,dk}{k^2}\rightarrow\infty$$

a termikus energiánál kisebb energiájú, termikusan gerj. magnonok tetsz. véges hőm.-en leromlják a rendszert (~~termikus~~)!

(de a $T=0$ alapállapot $\exists$)

(a 1D-ben ~~a~~ még jobban divergál)

antiferromágnesnél hasonlóan:

$$\langle S^z_{r_i}\rangle = S - \frac{2}{N}\sum_k \left(u_k^2+v_k^2\right)\cdot\frac{1}{e^{\beta\Delta k}-1} =$$

$$= \frac{5}{4}\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{(\pi)} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{12}$$

2D : edges

2D } length
4D }

$\Rightarrow$ Antil-de Sitter-Schwarzschild: Φ is 2D-dim. and $T=0$ or

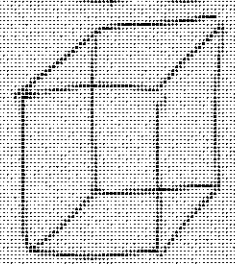
$\left[\frac{\text{length}}{\text{area}}\right]$ (4D-dim. $T=0$ or other Schwarzschild-AdS)

dim. $\Rightarrow$ ∞), i.e. $T \neq 0$ or mod. the entropy

Schwarzschild $\Rightarrow$ (always negative specific heat

$\Rightarrow$ stable phase eq. by length $\Rightarrow$ ∞)

5) December 2011



$\Rightarrow$ $\mathbb{R}^3$ $\mathbb{R}$ on, $\mathbb{R}$ on $\Rightarrow$ tangent $\mathbb{R}$ on vectors?

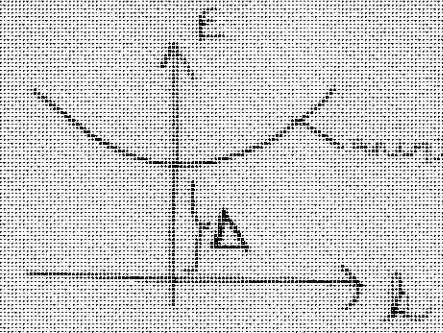
$$\xi^\mu \xi^\nu \nabla_\mu \xi_\perp (\xi^\lambda \xi^\rho + \xi_\perp^\lambda \xi_\perp^\rho) + \nabla_\mu \xi^\nu$$

$\Rightarrow$ Mat. eigenfunction $\Rightarrow$ Gottlieb-Abel con.

Integer

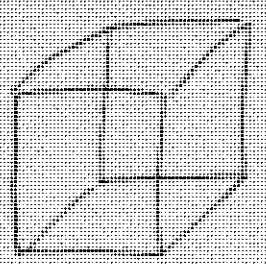
(Tangent field vanishes on the non-null!)

$\Rightarrow$ ~~2D~~ linear which has multiple labels.



[illegible]

[illegible]



[illegible]

[illegible]

$$R = -\frac{1}{4} \sum_{\gamma} \sum_{\alpha} \sum_{\beta}$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

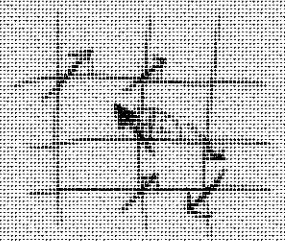
[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]



$$\vec{S}_i = \cos\varphi_i$$

$$\vec{S}_j = \sin\varphi_i$$

$$(\cos\varphi_i \cos\varphi_j + \sin\varphi_i \sin\varphi_j) =$$

$$= \cos(\varphi_i - \varphi_j)$$

[illegible]

$$\boxed{E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\varphi_i - \varphi_j)}$$

$\varphi_i - \varphi_j$ [illegible]

[illegible]

(la energía [illegible] energía [illegible] [illegible])

$$E = E_0 + \frac{1}{2} J \sum_j (\varphi_i - \varphi_j)^2$$

$\varphi_i \to \varphi(r)$ [illegible]

[illegible] ($\varphi(r)$ [illegible] [illegible]

[illegible])

$$E = E_0 + \frac{J}{2} \int d^d r \, (\nabla \varphi(r))^2 \to E_0 + \frac{J}{2} \sum_k k^2 |\varphi_k|^2$$

$$\varphi(r) = \frac{1}{V} \sum_k e^{ikr} \varphi_k \quad \varphi_k, \varphi_{-k} = \varphi_k^*$$

[illegible]

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k_B T = \frac{J}{2} k^2 \langle |\varphi_k|^2 \rangle$$

[illegible]

$$\langle |\Delta\vec{p}|^2 \rangle = V \frac{\hbar^2 T}{\pi \hbar^2}$$

[illegible] energy [illegible]

[illegible]

$$\langle \vec{S}\vec{S}' \rangle \ni \langle \vec{S}(0)\cdot\vec{S}(0) \rangle = \langle e^{-i[\varphi(0)-\varphi(0)]} \rangle =$$

$$= \frac{\langle e^{i(\varphi(0)-\varphi(0))} + e^{-i(\varphi(0)-\varphi(0))} \rangle}{2} \quad \frac{1}{\pi} \int \frac{e^{-\pi/\xi}}{\xi^2}$$

([illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible])

$$\langle e^{i(\varphi(0)-\varphi(0))} \rangle$$

$$\varphi(0)-\varphi(0) = \frac{1}{V} \sum_k (e^{ikr}-1)\Delta\varphi_k$$

$$\langle e^{C} \rangle = e^{\frac{1}{2}\langle C^2 \rangle}$$

[illegible] $\left(\sum \frac{e^{-\beta\varepsilon_k}}{\varepsilon_k}\right)$

$$\langle e^{\frac{1}{V}\sum_k (e^{ikr}-1)\Delta\varphi_k} \rangle = e^{\frac{1}{2}\langle \Delta\varphi \sum (e^{ikr}-1)\Delta\varphi_k \rangle} =$$

$$= 4\pi \left[-\frac{1}{2}\frac{1}{k_2} \sum_{k_1} \left(\omega_{k_1} \, \delta_{k_1} \left[e^{ik_2} - 1 \right] \left(e^{-ik_2} - 1 \right) \right) \right] =$$

$$\text{[illegible]} \quad k_2 = -k_1$$

$$= 4\pi \left(-\frac{1}{2}\frac{1}{k_2} \sum_{k_1} |\delta_{k_1}|^2 \right) \left(e^{ik_2} - 1 \right)\left(e^{-ik_2} - 1 \right) = 4\pi \left[\frac{1}{k_2} \frac{k_2 T}{2\pi} \left[e^{ik_2} + e^{-ik_2} \right] \right]$$

$$= 4\pi \left[\frac{1}{2\pi} \frac{k_2 T}{2\pi} \left(2 - e^{ik_2} - e^{-ik_2} \right) \right] = 4\pi \left[\frac{1}{\pi} \frac{k_2 T}{2\pi} \left(1 - \cos k_2 \right) \right] =$$

$$= 4\pi \left[\frac{1}{\pi} \frac{k_2 T}{2\pi} \left(1 - \cos(k_2 - 0) \right) \right] =$$

[illegible]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} \, dx$$

[illegible]

$$= 4\pi \left[-\frac{1}{\pi} \frac{k_2 T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin k_2}{k_2} \left(1 - \cos(k_2) \right) \right] =$$

$$k_2 = 0 \Rightarrow \frac{0}{0}$$

[illegible]

$$-k_2 < k_2 < k_2 = 0$$

$$k_2 > 1 \quad \text{[illegible]}$$

[illegible] $(k_2 \in \mathbb{R})$

$$= 4\pi \left[-\frac{1}{\pi} \frac{k_2 T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin k_2}{k_2} \left(1 - \cos(k_2) \right) \right] = 4\pi \left(-\frac{1}{\pi} \frac{k_2 T}{2\pi} k_2 \left(\frac{\pi}{2} \right) \right)$$

[illegible]

$$= \frac{1}{2}\left[\omega(\theta) - \omega(0)\right] = \left(\frac{\theta}{2}\right)^2$$

$$\text{and } \boxed{n = \frac{\pi}{\theta}}$$

other non-symmetric case to be handled

$$\left(\frac{\pi}{2}\right) \text{ is a bifurcation point, applied}$$

$$\lim_{n \to \infty} \{ \to \infty$$

when we add, hence

upper matrix is real

b) is the bifurcation at finite?

$$= (\theta_x - \theta_y) \text{ is finite bifurcation!}$$

$$N = \theta_x - \theta_y$$

$$\sum_c \theta_i = 2\pi$$

(is a magnetic field will give long range ordering

spread beyond lattice

is the magnetic case for finite!

[illegible]

[illegible]

$\theta_2 = \theta_1 + 2$ [illegible]

$\theta_2 = \theta_1 + 2\pi$ [illegible]

$\Downarrow$

[illegible]

[illegible]

$\Downarrow$

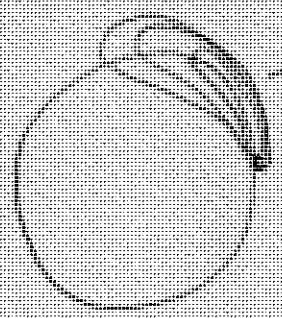
[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

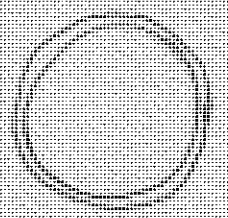
[illegible] vortex [illegible] by [illegible]



→ vortex → [illegible]

[illegible] 1 [illegible] vortex

[illegible]



→ [illegible] vortex [illegible] 1 [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

$r \to 0$ (core) → [illegible] → [illegible] [illegible]

[illegible]

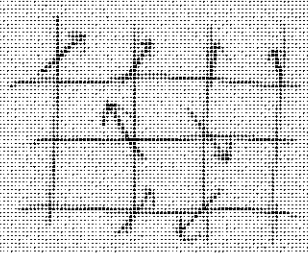
[illegible] vortex [illegible]

[illegible] vortex energy:

$$E = E_1 + \frac{1}{2} \rho \int dr\, (\nabla\theta)^2 = E_1 + \frac{1}{2} \rho \int_L^{\Lambda} 2\pi r\, dr \left(\frac{\kappa}{r}\right)^2 =$$

[illegible] $\int |\nabla\theta|^2 = 2\pi\kappa$

$\int |\nabla\theta|\, 2\pi r = 2\pi\kappa$ $\quad \nabla\theta = \frac{\kappa}{r}$



[illegible] [illegible] [illegible]

core radius

$$= E_1 + \pi \rho \kappa^2 \ln\left(\frac{L}{a}\right)$$ [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] vortex energy

$$F = E - TS \qquad S = k_B \ln\left(\frac{L}{a}\right)^2 = 2k_B \ln\left(\frac{L}{a}\right)$$

$\Rightarrow P = \pi \bar{\gamma}^2 R_{eff} \frac{L}{a} = 2 k_B T \Delta\omega \frac{L}{a}$

$$\boxed{\pi \bar{\gamma}^2 = 2 k_B T_{BKT}}$$

BKT: Bedeutung, Entstehung, Phononen

abnormal Abhängigkeit von Temperatur entsteht in

engen Umgebung mit 1

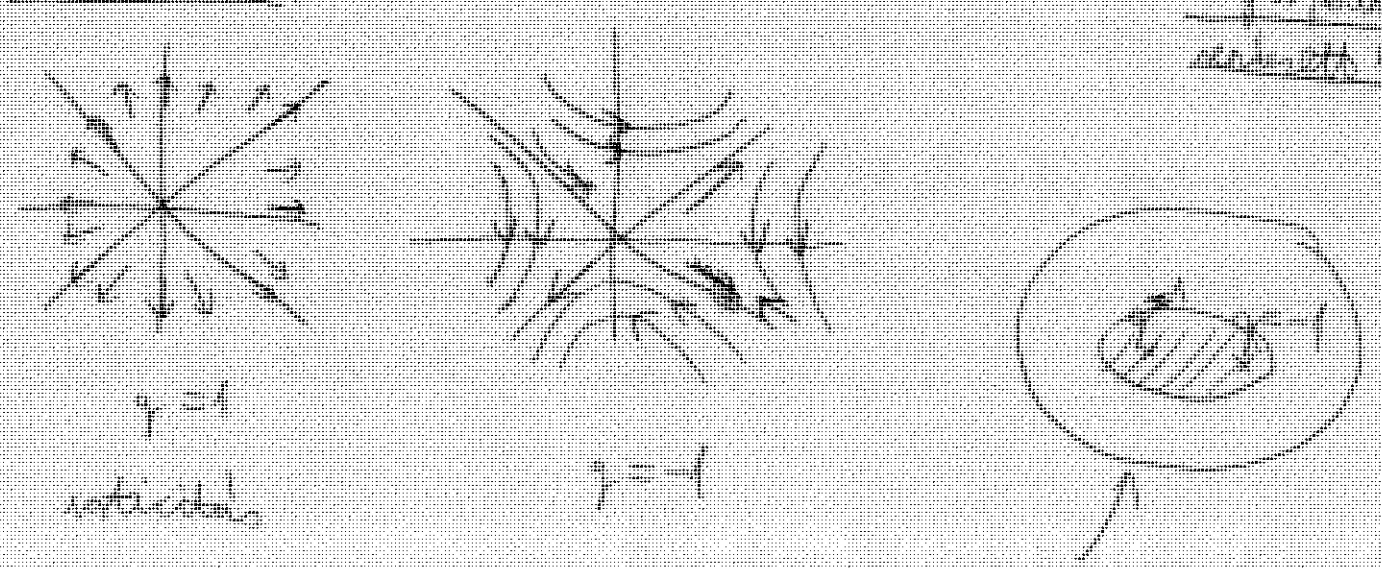
$\Rightarrow$ Ähnlich wie Ising Modell, nur Indexth, der

- $0 \le T \le T_{BKT}$ Abhängigkeit $(\bar{\gamma}_{eq}(T)) \sim \frac{1}{T}$ Lange

- $T \ge T_{BKT}$ exponentiell $\frac{\text{Energie}}{\text{Energie}}$

$\frac{\text{Spin-Winkel}}{\text{Winkel}}$

c) Grafische Erklärung:



$\gamma = 1$ $\gamma = -1$

entdreht

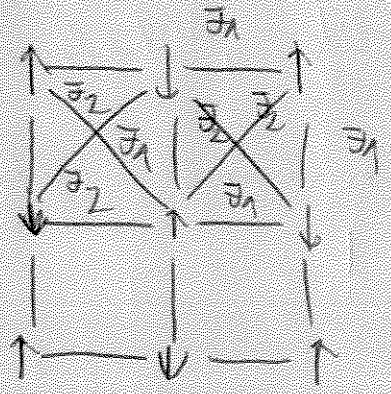
In Fig. $\gamma = 1$ & $\gamma = -1$ → hoch Energie, aber

Winkel & Abstand entlang Energie

⇒ alacsony hőmérsékleten is megjelennek vortex párok egymástól véges távolságra

2) $\boxed{T=0}$:

a)



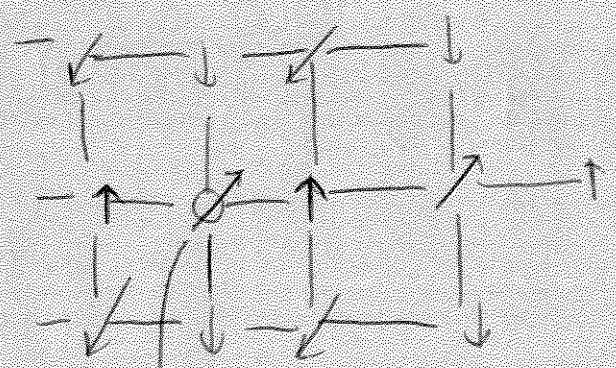
$J_1 < 0$

$J_2 < 0$

Mi történik, ha van másodszomszéd kh.?

→ a 2 kh. elkezd versenyezni egymással!

•

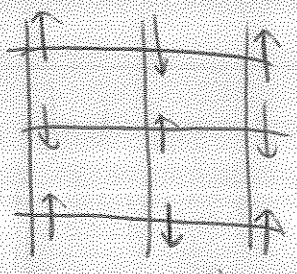


ha $|J_2| > |J_1|$

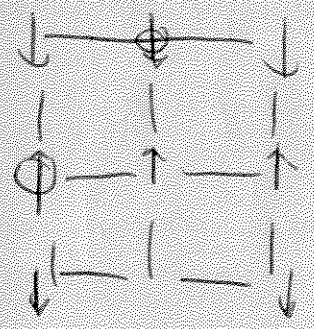
ez hogy fog J_1 mintt kelni? Sehogy, mert nem lesz erős külső tér

→ van egy ∞ nagy degeneráció klasszikus esetben

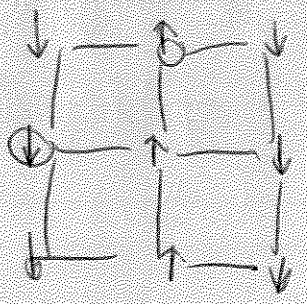
• $|J_1| \gg |J_2|$



$J_1 < J_2$



vagy



energetikailag azonos
<u>ferromágneses állapot</u> alakulnak ki

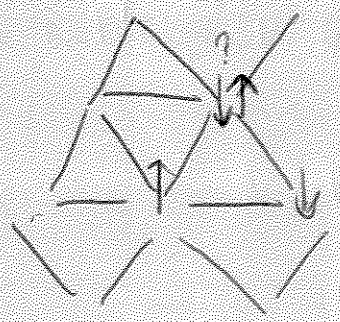
- ha $J_1 \approx J_2$

<u>frusztrált</u> lesz a rsz.! A spinek össze-vissza állnak, kialakul egy „<u>spin-folyadék</u>"

↳ $\langle S_i^2 \rangle = 0$ (nincs lokális rendeződés)

↳ spinek közötti korreláció exponenciálisan lecseng

b) <u>Δ rács</u>:

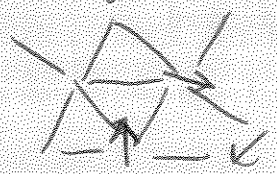


$J < 0$

$0, \pi$

ez is frusztrált lesz. Spin-folyadék? → V: Nem!

Részlegesen kiéglett ferromágneses csatolás lesz.



$0, \pm\frac{2\pi}{3}$

[illegible]

[illegible] $\boxed{\text{Legendre}}$

(per-tail [illegible])

[illegible]

[illegible]

$\langle S(x) | S(0) \rangle \sim \frac{1}{|x|}$ [illegible]

[illegible]

$S = \frac{1}{2}$

$\boxed{\text{Bethe-Ansatz}}$

[illegible]

$\psi_{12} = (e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} - e^{ik_2 x_1} e^{ik_1 x_2}) \frac{1}{\sqrt{2N}}$ spinless [illegible]

[illegible]

spinless $k_1 + k_2 = k_3 + k_4$

[illegible]

$e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} \Rightarrow e^{ik_1 x_1 + i\theta_{12}} e^{ik_2 x_2 - i\theta_{12}}$

[illegible]

[illegible] (Bethe-Ansatz [illegible])

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$H_0(r)\,\Psi(r) = \varepsilon\,\Psi(r)$$

[illegible]

[illegible]

$$\Psi(r_1 \ldots r_{500}) = \psi_1(r_1)\,\psi_2(r_2)\,\psi_3(r_3) \ldots \psi_{500}(r_{500}) -$$

$$- \psi_2(r_1)\,\psi_1(r_2) \ldots$$

[illegible]

[illegible]

$\Rightarrow$ [illegible]

$$H_0(r)\,\Psi(r) = \varepsilon\,\Psi(r) \qquad H_0(r+L_x) = H_0(r)$$

[illegible] $\Psi_L(r+L_x) = e^{iKL_x}\,\Psi_L(r)$

[illegible] $\Psi_L(r)$ [illegible]

[illegible]

$$\Psi_L(r) \equiv e^{iKr}\,u_L(r)$$

[illegible]

$$u_L(r+L_x) = e^{-iK(r+L_x)}\,\underbrace{\Psi_L(r+L_x)}_{e^{iKr}\,\Psi_L(r)} = e^{-iKr}\,\Psi_L(r) = u_L(r)$$

[illegible]

$u_L(r)$ [illegible]

$$K_{\mathbf{k}}(r) = \left(\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla\right]^2 + U(r)\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(r) =$$

$$\uparrow$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\text{Pauli-Schr.} \quad \Psi$$

$$K_{\mathbf{k}}\Psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar\mathbf{k}\right)^2 + U(r)\right] u_{\mathbf{k}}(r) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\Psi(r) =$$

$$= \varepsilon_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(r)$$

$$\Downarrow$$

$$\underbrace{\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar\mathbf{k}\right)^2 + U(r)\right]}_{} u_{\mathbf{k}}(r) = \varepsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(r)$$

$$K_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(r) = \varepsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(r)$$

(→ regelmäßig, periodisch

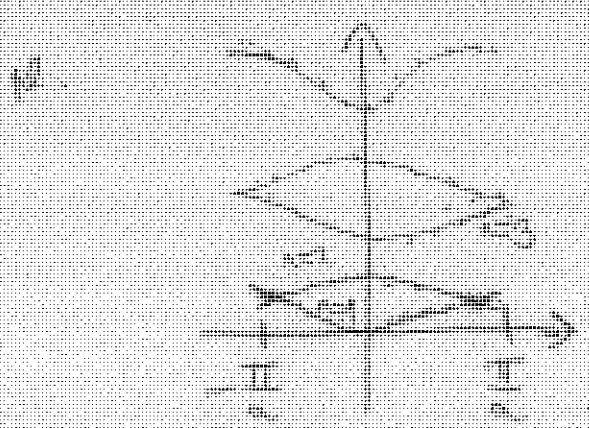
$$K_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(r) = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(r)$$

→ Y hängt von Index ab

→ k unterscheidet mehr Möglichkeiten

→ n → jetzt k-ter Index → Energie (Band-Index)

(→ zweiter Index ist Band)



diagonale Linie, $\frac{\pi}{a}$

Abstand zu

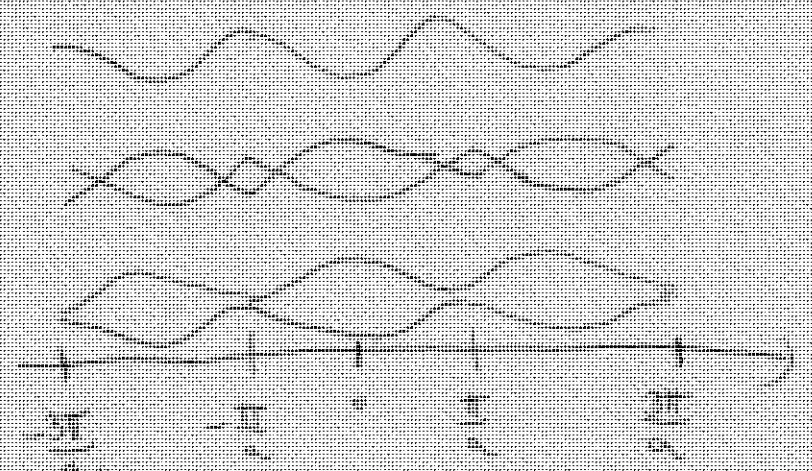
(erste Zone, Reduzierte, erstes

N reduzierte Bänder)

2) [illegible]

[illegible]

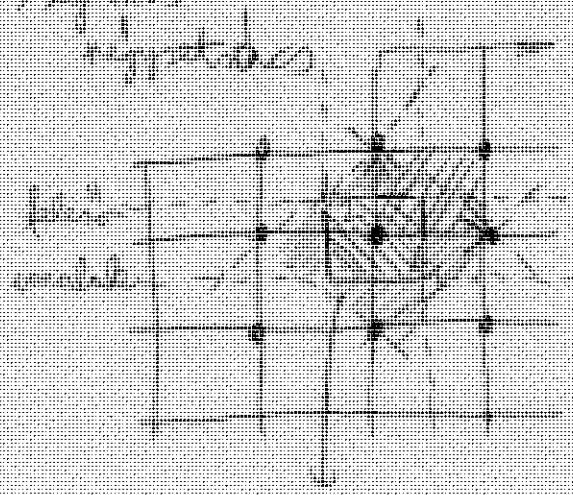
[illegible]



[illegible]

[illegible]

[illegible]



[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

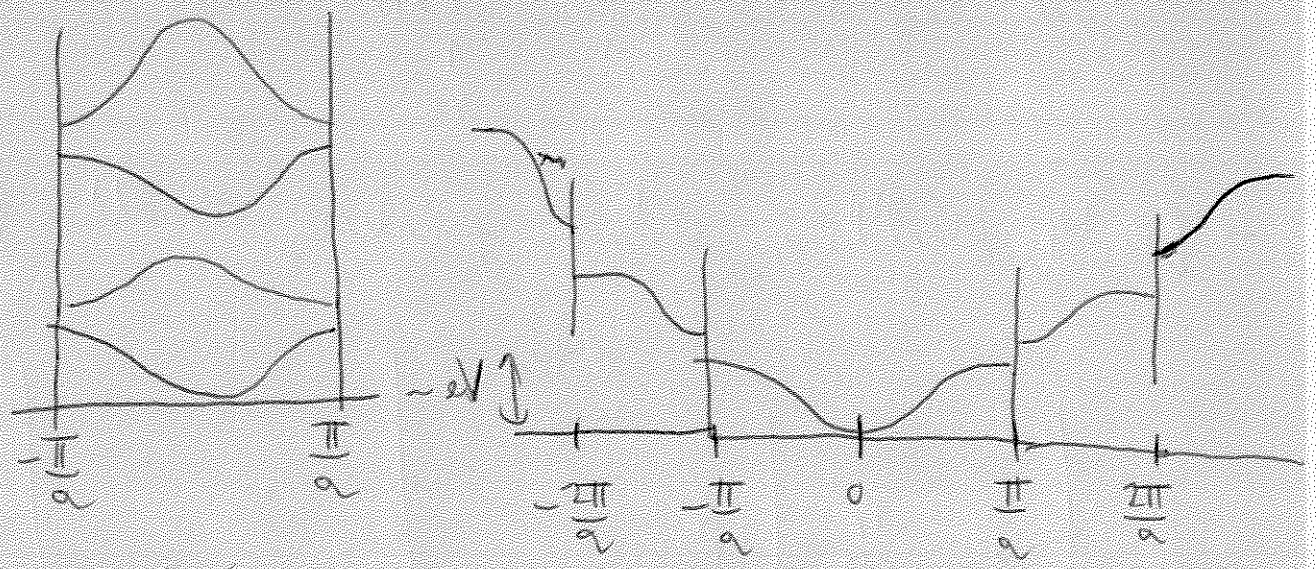
[illegible]

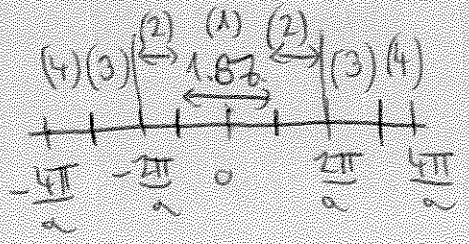
[illegible]

[illegible]

[illegible]

Hogy fog ez kinézni?





kitüntetett zóna

(1): 1.67
(2): 2.67
⋮

3) $\frac{\text{sávok betöltése}}{N_e \text{ elektron}}$:

N sávok le pontok (N = elemi cellák száma, nem atomok száma)

sávok ~eV szélességek ($eV \sim 10^4 K$)

⇒ a termikus mozgásból eredő energia bizonytalanság elhanyagolható

⇒ az e^--ok szép sorban elkezdik betölteni alulról a sávokat

[illegible]

[illegible]

$\sigma > 10^{6}\ (\Omega m)^{-1}$ [illegible] $\Rightarrow (\rho < 1\ \mu\Omega m$

(Metal $\sigma < 10^{6}\ (\Omega m)^{-1}$ [illegible]) [illegible])

$\sigma < 10^{-2}\ (\Omega m)^{-1}$ [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible]

[

then

χ and C_v behave $\propto T$ [illegible]

[illegible] $T \to T/T_F$ [illegible]

$\left(\frac{T}{T_F}\right)^2 \left(\frac{T}{T_F}\right)$

A) [illegible]

$$g(\epsilon)\,d\epsilon = dN(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$$

[illegible]

$$E = \int_0^{\epsilon_F} \epsilon\, g(\epsilon)\, d\epsilon \qquad T=0$$

$$E = \int_0^{\infty} \epsilon\, g(\epsilon)\, f(\epsilon)\, d\epsilon \qquad T \neq 0 \qquad \mu(T=0) = \epsilon_F$$

[illegible] $f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$ $\mu(T)$

$\mu \approx \epsilon_F$ [illegible]

(a [illegible])

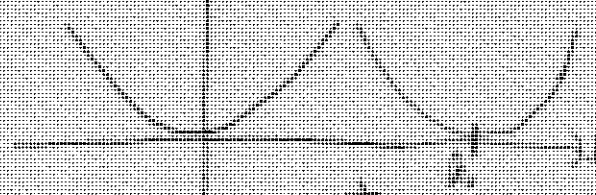
$\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) \Rightarrow g(\epsilon) \sim \sqrt{\epsilon}$

[illegible]

$\Rightarrow g(\epsilon_F)$ [illegible]

$C_V \sim \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T\, g(\epsilon_F) \quad \chi \sim \mu_B^2\, g(\epsilon_F)$

[illegible]



$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon_0 + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}(k-k_0)_\alpha (k-k_0)_\beta$$

- [illegible]

[illegible]

[illegible]

$$k = \frac{p}{\hbar} \qquad m^* = \frac{[illegible]}{[illegible]}$$

- [illegible]

$$k_{eff} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_k}{\partial k_\beta} = \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta}$$

[illegible]

- [illegible] $g(E_F) = g(E_F, m^*)$

[illegible]

[illegible]

- [illegible] $m^* = f(m_e)$ [illegible]

[illegible]

a) Ex:

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

(theorem, p. 24)

$$\boxed{H\,\psi_{nk}(r) = [\varepsilon_k]\,\psi_{nk}(r)}$$

↓

normalized as usual

A) Alternative formulation (optional)

$\psi^{(N)} \rightarrow \varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_N$ labelled by wave vector

$$c_{k_1}^{\dagger} \ldots c_{k_N}^{\dagger} |0\rangle \quad (\text{eigenstate of } H)$$

↓

ε_N labelled by bands

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \underbrace{c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}}_{n_{k\sigma}} \qquad [c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}^{\dagger}] = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}$$

eigenstates

hop to next state

↓

ε_k depends (between bottom and top)

values taken up, each a distinct orbital

(a V orbitals aggregate)

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$|\Phi_S\rangle = \prod_{k \le k_F} c_k^\dagger |0\rangle$$

[illegible]

[illegible]

$$\Rightarrow \begin{cases} c_k^\dagger & |k| > k_F \\ c_k & |k| < k_F \end{cases}$$

[illegible]

[illegible]

$$\Delta E_{N\to N+1} = \underbrace{\underbrace{E - \mu N}_{(E_S - \mu N)} \Rightarrow E_S + \varepsilon_{k_0} - \mu(N+1)}_{\text{[illegible]}} - \underbrace{(E_S - \mu N)}_{\text{[illegible]}} = \underbrace{\varepsilon_{k_0} - \mu}_{\text{[illegible]}}$$

[illegible]

$$\Delta E_{N\to N-1} = E - \mu N \Rightarrow E_S - \varepsilon_{k_0} - \mu(N-1) - (E_S - \mu N) = \underbrace{\mu - \varepsilon_{k_0}}_{\text{[illegible]}} > 0$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$\psi(\mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

→ [illegible]

$$\langle \psi_{ab}(q)|K|\psi_{ab}(q)\rangle = \int \psi_{ab}^*(q) K(q) \psi_{ab}(q)\, dq =$$

$$= \sum_y c_{ab}^*(y) c_y(b) K_y(b)$$

$$\langle \psi_{ab}(q)|\psi_{ab}(q)\rangle = \int \psi_{ab}^*(q)\psi_{ab}(q)\, dq = \sum_y c_{ab}^*(y) c_y(b) c_y(b) \quad \text{normalized}$$

$$\langle \psi|K|\psi\rangle - \lambda\langle\psi|\psi\rangle = \sum_y c_{ab}^*(y) c_y(b) K_y - \lambda c_{ab}^*(y) c_y(b)$$

λ = [illegible] $c_y(b)$

(b) [illegible] [illegible]

$\Rightarrow \lambda = \varepsilon_{ab}$,

[illegible] [illegible] [illegible]

→ [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

→ [illegible] [illegible]

$$\psi_{ab}(q) = \sum_y c_y(b) u_y(q)$$

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible] [illegible] [illegible] [illegible]

[illegible]

$$\underbrace{e^{i(k+G_j)r}}$$

$$E_{G_j} = \frac{\hbar^2 (k+G_j)^2}{2m} \quad (U=0)$$

$\Rightarrow$ nagy G_j-k nagy energiajárulékot adnak $\Rightarrow$ ezeket már nem vesszük figyelembe

(még így is sok G_j-t kell figyelembe venni)

Mi lesz a disp. reláció?

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

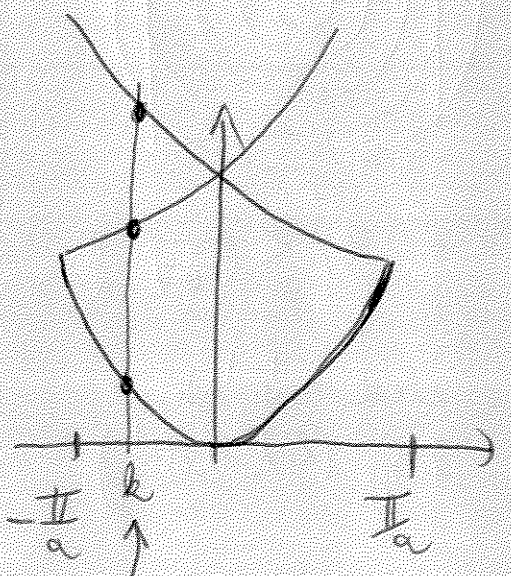
$$\varphi_j(k,r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k+G_j)r}$$

$$\psi_{nk}(r) = \sum_j c_{nj}(k) \cdot \varphi_j(k,r)$$

- $U(r) = 0$ $\quad \varepsilon_{nk} = \frac{\hbar^2}{2m}(k+G_j)^2$

$$G_j = \frac{2\pi}{a} \cdot j$$

$$(j = -\infty, \infty)$$



- $U \Rightarrow$ véges : $k \Leftrightarrow k+G_j$ (ezek keverednek) $\xrightarrow{\text{perturb. számítás}}$

$$\varepsilon_{G_i} = \varepsilon_{G_i}^{(0)} + \frac{|U(G_i - G_j)|^2}{\varepsilon_{G_i}^{(0)} - \varepsilon_{G_j}^{(0)}}$$

$\Rightarrow$ a nívók taszítják egymást

Graph indicate 4 1

04 ~ [illegible] ~ [illegible] [illegible]

[illegible] 1

- [illegible]

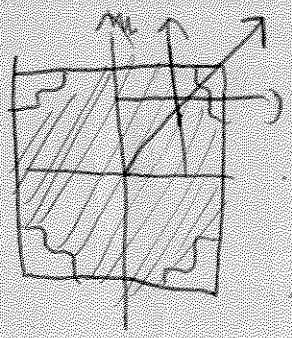
- [illegible]

[illegible]

[illegible]

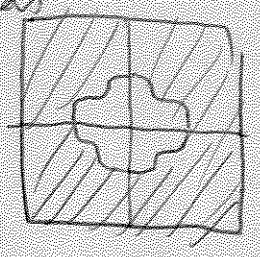
- [illegible] (NAO [illegible] [illegible])

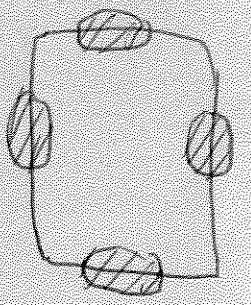
(Rate-[illegible]
1.19
[illegible])



1.BZ.

elbontás





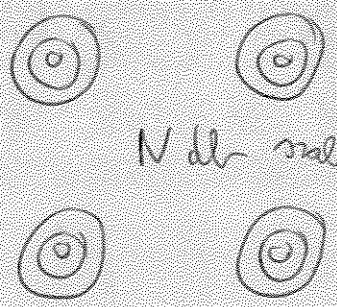
2.BZ.

így lesz folytonos

ez vezet ← Fermi-felület,
van, mert de a -||- -en
tele a betöltött
állapot, mint felül nincs betöltött
a vezető vel., állapot, kívül ugyan
célszerűbb ezek
nyelőn lenni
a Fermi-felületet

2.2: Atomi állapotokból való felépítés

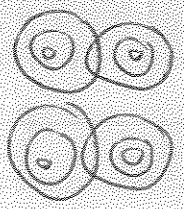
degen.



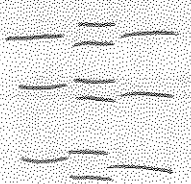
N db szabad atom $\xrightarrow{\text{sávszerkezet}}$

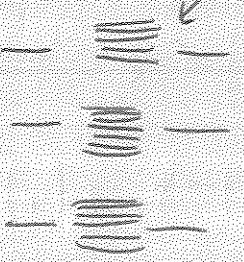
3s ——— ×N
2p ——— ×N
2s ——— ×N
1s ——— ×N

↓ atomok közelítése



2 atom → N atom





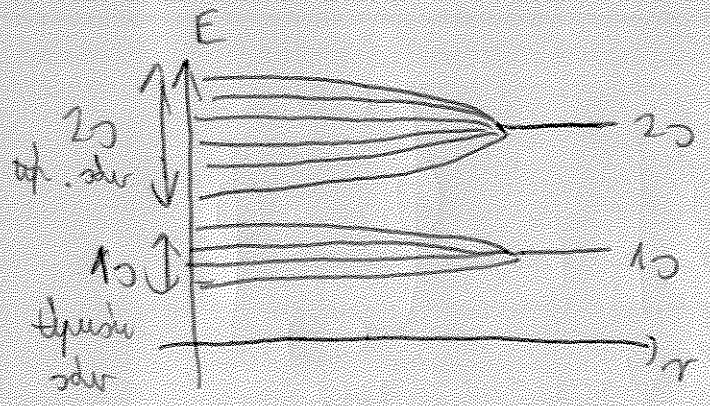
N× felhasadás

↓

sávok alakulnak ki

↑

2× felhasadás



$$\varphi_j(k,r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} e^{ikR_m} \cdot w_j(r - R_m)$$

atomi hlv.

(Bloch-tul.-nak megfelel)

(es a hlv. nr. nem ortogonális!

→ kül. atomban lévő azonos hlv-ek átfedhnek

LCAO - módszer

tetsz. számú (de véges) állapot megengedett

szoros kötésű közelítés (TBA = tight-binding approximation)

a szomszédos atomok csak kis mértékben fedhnek át, és atomonként csak 1 állapotot veszünk figyelembe (LCAO leegyszerűsítő változata)

Wannier-állapotoknak feelnek meg az atomi hlv.-ek lin. kombinációja

Bloch-állapotok: ~~(tényleg~~ sikhullámok felől közelítjük meg az állapotokat

$$\mathcal{H}(r)\,\psi_{nk}(r) = \varepsilon_{nk}\,\psi_{nk}(r)$$

$$\psi_{nk}(r+t_n) = e^{ikt_n}\,\psi_{nk}(r)$$

$$\psi_{n,k+G}(r) = \psi_{n,k}(r) \rightarrow k \text{ tben per. fv.}$$

[illegible]

$$u(r) = u(r + R_n)$$

$$u(r) = \sum_{G} u_G e^{iGr}$$

[illegible]

[illegible]

$$\psi_{nk}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R} e^{ikR} \varphi_n(r - R)$$

[illegible]

[illegible]

$$\varphi_{nk}(r) = \varphi_n(r) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R} e^{ikR} \varphi_n(r - R)$$

$$\varphi_n(r) \quad \varphi_n(r - R)$$

$$\varphi_n(r + R, R_m + R_n) = \varphi_n(r, R_m)$$

$$\Rightarrow \varphi_n(r - R_n)$$

[illegible]

[illegible]

$$\psi_{nk}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n} e^{ikR_n} \varphi_n(r - R_n)$$

$$\boxed{\varphi_n(r - R_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k} e^{-ikR_n} \psi_{nk}(r)}$$

[illegible]

[illegible]

[illegible]

$$\mathcal{H}\,\varphi_n(r-R_m) = \sum_{R_l} t_{n,m,l}\,\varphi_n(r-R_l)$$

$\Downarrow$

az R_m rácspontban levő állapot a potenciál miatt nem marad ~~ugyan~~ lokalizálva !!!

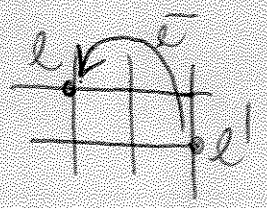
c_m^+, c_l^+, c_l $\qquad$ $t_{n,m,l}$: átugrási (hopping) amplitúdó

$c_m^+ \to$ +1 e^- az m. rácspontban

$c_l \to$ −1 e^- az l. rácspontban

$$\boxed{\mathcal{H} = \sum_{n,l,l'} t_{n,l,l'}\, c_l^+ c_{l'}}$$

általánosan az energia (mozgás) ilyen ugrásokkal írható le



$$\mathcal{H}\varphi_n(r-R_m) = \sum_{R_l} t_{n,m,l}\,\varphi_n(r-R_l)$$

$\Downarrow$

az R_m rácspontban levő ~~állapot~~ a potenciál miatt nem marad ~~ugyan~~ lokalizálva !!!

c_m^+, c_l^+, c_l

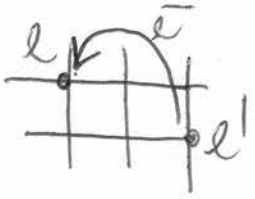
$\downarrow$ +1 e^- az m. rácspontban

$\downarrow$ −1 e^- az l. rácsp.ban

$t_{n,m,l}$: átugrási (hopping) amplitúdó

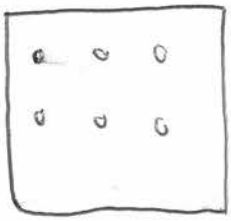
$$\boxed{\mathcal{H} = \sum_{n,l,l'} t_{n,l,l'}\, c_l^+ c_{l'}}$$

Általánosan az energia (mozgás) ilyen ugrálásokkal írható le



10. óra

0) Tsm.:



$$U(r) = U(r+t_n)$$

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

(k) $\psi_{nk}(r) \Rightarrow \varepsilon_{nk}$

$\varphi_j(k,r) \nearrow \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot e^{i(k+G_j)r}$ síkhullám módszer ~~erősítés~~

$\downarrow$

a lokalizáltt állapothoz nagyon sok hullám kéne

$\Downarrow$

$$\Downarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} e^{ikR_m} w_j(r-R_m)$$

atomi pályák lineárkombinációja (LCAO)

1) Mindkét módszerrel viszonylag sok hullamfv.-t kell keresni → lehetne-e <u>kombinálni</u> a 2 módszert?

~~(szórási állapotok)~~ valencia e^--k → síkhullám módszer

törzsi állapotok → LCAO

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} w_\alpha(r-R_m)\, e^{ikR_m} = \varphi_\alpha(k,r)$$

ezek adják a vezetési tulajdonságokat

• olyan síkhullámokat veszünk, melyek <u>ortogonálisak a törzsi állapotokra</u>!

$$\varphi_j(k,r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k+G_j)r} - \sum_\alpha \mu_\alpha(k)\cdot\varphi_\alpha(k,r)$$

$$\cancel{\left(\int \varphi_j(k,r)\,\varphi_\alpha(k,r)\,dr = 0\right)}$$

$$\int \varphi_j^*(k,r)\,\varphi_\alpha(k,r)\,dr := 0 \quad \text{(~~ortogonalitási mellék~~)}$$

$$\Rightarrow \mu_\alpha(k) = \langle \varphi_\alpha | k+G_j \rangle$$

$$|\varphi_j\rangle = |k+G_j\rangle - \underbrace{\sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}_{P}\cdot|k+G_j\rangle = (1-P)\cdot|k+G_j\rangle$$

OPW módszer (ortogonalized plainwave)

Számításból:

- Det $\left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m}(k+G_j)^2 - \varepsilon_k \right] \delta_{ij} + U_{ij} \right\} = 0$ } síkhullám módszer

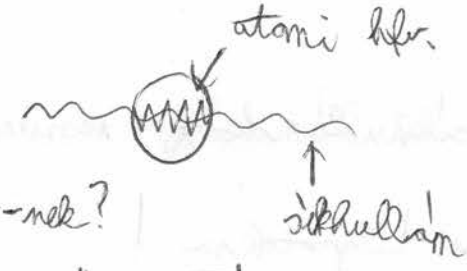
  ahol: $\langle k+G_i | U | k+G_j \rangle = U_{ij}$

- Det $\left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m}(k+G_j)^2 - \varepsilon_k \right] \delta_{ij} + \Gamma_{ij} \right\} = 0$

  ahol: $\Gamma_{ij} = U_{ij} + \sum_\alpha (\varepsilon_k - \varepsilon_{\alpha k}) \cdot \mu_\alpha^*(k+G_i) \cdot \mu_\alpha(k+G_j)$ } OPW módszer

  valencia e⁻-ok energiája — törzsi e⁻-ok energiája

- Várakozás: más nem kell olyan sok síkhullámot figyelembe vennem azonos pontossághoz



- Mi az ára a kevesebb bázisfv-nek?

  U_{ij} helyett Γ_{ij}, ami energiafüggő is!

  Viszont U_{ij} singuláris potenciál (Coulomb-pot. → $\frac{1}{k^2}$)

  Belátható, hogy Γ_{ij} kisimul, nem singuláris (~~→~~ renormált potenciál)

  a tavoli energiákat elimináltuk

(Megj.: a fémeknél azért jó a szabad e⁻ közelítés, mert a törzsi e⁻-ok lecsökkentik a mag potenciálját)

2) Mi jön ki a modellekből?

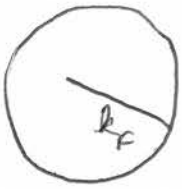
a) 1 vegyértékű: alkálifémek (~~nemesfémek~~)

↓

bcc kristály, 1db s e^-,

kárisszalad e^- kép használható

$\varepsilon_k \sim \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (várakozás)



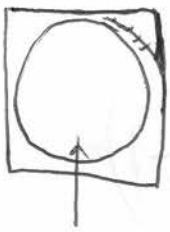
Fermi-gömb

$$\frac{4\pi k_F^3}{3} \Big/ \frac{(2\pi)^3}{V} = \frac{N}{2}$$

csak a spinek egyik fajtája van ~~ebben~~ ezeken az állapotokban

(Ezzel tudjuk szorozni → spin miatti deg.)

ha kiszámoljuk k_F-et:



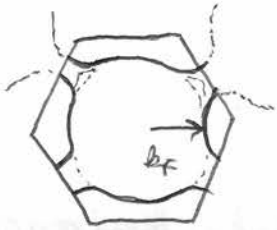
Fermi-gömb

– nemesfémek: fcc

→ itt is belelépünk a BZ-ba, de jobban megközelíti a Fermi-gömb a BZ szélét + a elektronok energiája is közelebb van

⇓

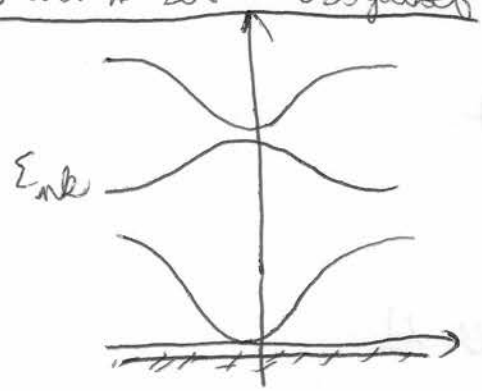
jobban torzul a Fermi-gömb



↓

újfajta topológia jelenik meg

3) Sávszerkezet vizsgálat



a) Fény → szórás
→ elnyelés

b) positron + e^- → 2γ

lassú e^+: $mc^2 + mc^2 = \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 =$ (annihiláció)
k_1 k_2

$= \hbar c k_1 + \hbar c k_2$

és:

$\vec{p}_e = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$ $\left(|\vec{p}_{e^+}| \ll |\vec{p}_{e^-}|\right)$

$k_1 \sim k_2 \approx \frac{mc}{\hbar} \gg \varepsilon_F$

ha $|p_e|$ is kicsi, akkor ϑ is kicsi: lényegében ellentétes irányba mennek

kvincidencián múlnak:

$2\hbar k_1 \sin\frac{\vartheta}{2} = p_e$

$\hbar k_1 \vartheta \approx p_e$

$\vartheta \sim p_e < \hbar k_F$ ⇒ ϑ-nak maximuma van, ha <u>Fermi-gömbön</u> van

ha nem Fermi-gömbön van → ϑ-ból k_F-et fel lehet térképezni (anizotróp eloszlás)
↳ $\varepsilon(k)$

a) fény ~~[illegible]~~

– Compton:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1-\cos\vartheta)$$

- ha nyugalomban lévő e⁻-on van: jól meghatározott hullámhosszúságú.
- ha mozog az e⁻ ⇒ Doppler-eltolódás: kiszélesedett vonal

– ~~fotoeffektus~~: (PES: photo-emission spectroscopy)

kilépési munka mérhető

UPS (UV-PES)
XPS (X-RAY-PES) } → csak a kötési energiára lehet következtetni

ARPES (Angular resolved) → szögfelbontott

disp. reláció is mérhető

Félvezetők

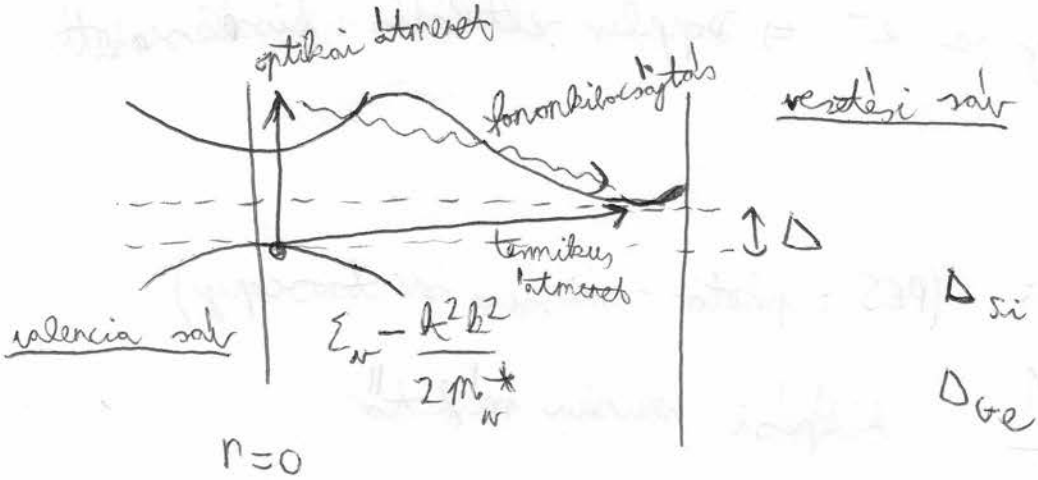
1) 'a' rácsállandójú gyémántrács, szabad e^- közelítés:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 (k+G_i)^2}{2m}$$

- sokszoros degeneráció
- nincs gap
- ~~torzított~~ parabolák

+ potenciál:

- feloldódik a degen. részben
- tiltott tartomány jelenik meg
- parabola kisimul némely helyeken

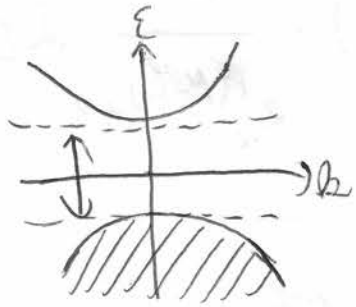


$\Delta_{Si} \sim 1{,}1 - 1{,}2\ eV$

$\Delta_{Ge} \sim 0{,}7\ eV$

- a vezetési sár minimuma nem a BZ közepén (Γ) van: indirekt gap
  - termikus átmenetnél ez nem baj
  - de optikai átmenetnél „függőleges gerjesztés" van ⇒ „kell. + fononkibocsátás" $(k_i + \cancel{q_k} = k_f$, $q \ll k)$
- direkt gap: vezetési sáv minimuma és val. sáv minimuma ugyanott (BZ közepén) – 10Z van

2) <u>közelítés: parabolikus diszperzió:</u>



$$\rho_c(\varepsilon) = \rho_c(\varepsilon - \varepsilon_c) \sim \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \quad \text{vezetési sáv}$$

$$\rho_v(\varepsilon) = \rho_v(\varepsilon_v - \varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon} \quad \text{valencia sáv}$$

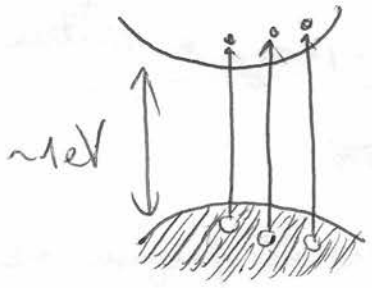
$$n_c = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \rho_c(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} d\varepsilon = \begin{cases} =0 & T=0 \\ \neq 0 & T \neq 0 \end{cases}$$

- Hol lehet a kémiai potenciál?

• ~~(T=0 esetben)~~ biztos a két sáv között van

• ha a rsz. szimmetrikus (azonos a görbület) → szimm. okok miatt pont középen lesz μ

• $T \neq 0$: „lyukak" alakulnak ki, vagyis e^- ok gerjesztődnek fel a vezetési sávba



$$n_v = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \rho_v(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} d\varepsilon$$

$$n = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \rho_v(\varepsilon) \left[1 - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \right] d\varepsilon$$

$\parallel$ felgerjesztett e^- ok sűrűsége $\quad \parallel \; n_v(T=0)$

$$\Rightarrow p = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \rho_v(\varepsilon) \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \rho_v(\varepsilon) \cdot \frac{1}{e^{\beta(\mu-\varepsilon)}+1} d\varepsilon$$

$\boxed{n_e = p}$ (vezetési e^--ok száma)

ha $k_BT \ll 1\,eV$ (szobahőm.) $\Rightarrow \frac{1}{e^{\beta(\mu-\varepsilon)}+1} \approx e^{-\beta(\mu-\varepsilon)}$, $\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \approx e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$:

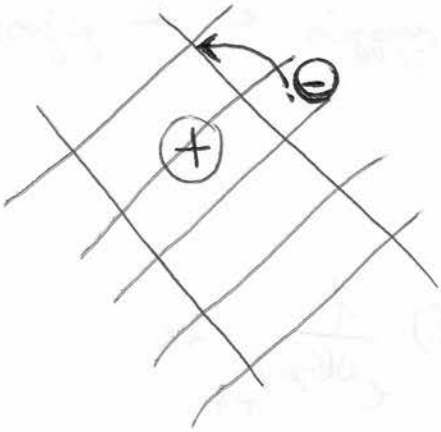
$$\Rightarrow \int_{\varepsilon_c} \rho_c(\varepsilon) \cdot e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} \rho_v(\varepsilon)\, e^{-\beta(\mu-\varepsilon)} d\varepsilon \quad \rightarrow \mu = \ldots$$

3) Szennyezett (adalékolt) félvezetők:

III, V

↓

a kötések kialakítása után marad még 1 e^--ja



de a magnak is van egy ⊕ töltése

↓

ha feltesszük, hogy a mátrix (rács) homogén (és a p_0):

⊕ mag belepja H-szerű pályára az e^--t!

~13 eV vákuumban

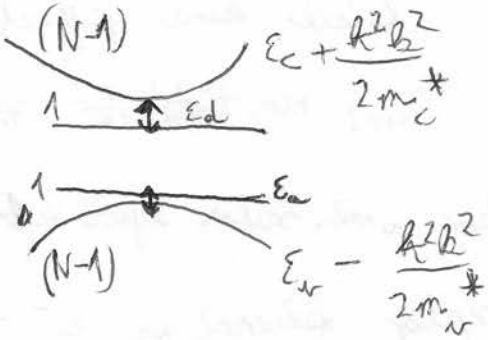
DE a mátrixnak is van potenciálja (homogén tere) → az egy dielektromos állandóként jelenik meg *:

$\frac{e^2}{\varepsilon r 4\pi\varepsilon_0}$ $\quad e \to e/\sqrt{\varepsilon}$ $\quad \varepsilon \sim 10$ nagyságrendű

+ az e^- nem szabad e^-ként viselkedik a rácsban → effektív tömeg közelítés m_e^*

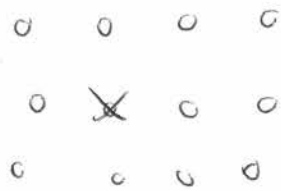
⇒ kötési energia 10 eV helyett $\boxed{10\ \text{meV}}$ nagyságrendű

• (Ezt már termikusan le tudja adni)



Miért nem jelenik meg lyuk akceptoroknál? (Miért

• 2N e^- fér el a szennyezetlen rs.ben



→ tovább is N állapot kell legyen (atomok száma miatt)

⇓

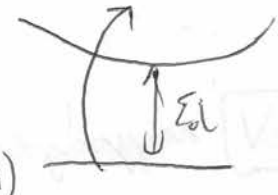
vezetési sávban csak N-1 állapot lesz + 1 donorszint

• akceptornál hasonlóan (N-1) állapot lesz a ~~dono~~ valenciasávban ≠ + 1 akceptorszint

→ akceptornál 2N-1 e^- : 2(N-1) +1 → N-1 állapot betöltött

1 állapot van az akc. miatt

= Tanulság: azért nem lesz lyuk az akceptoroknál a valencia-sávban ~~mert~~ (alapáll. lesz), mert kevesebb állapot lesz a sávban (N−1) !!!



(1) betöltöttség: $0, \uparrow, \downarrow, \cancel{\uparrow\downarrow}$

ezekben energiában lefelé kéne gerjesztődni, ami nem történik meg

(1) $\cancel{0}, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$

ilyenkor a val. sávban lyuk keletk.

⇒ donor szerepe lesz, akceptor felvenni az e^--t

n_d: $0, \uparrow, \downarrow, \cancel{\uparrow\downarrow}$ $\qquad$ n_d: donorok száma

$$f_d = \frac{\sum n_i e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu n)}}{\sum e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu n)}}$$

$$e^{-\beta\varepsilon_0} \qquad e^{-\beta\varepsilon_0 + \varepsilon_d - \mu}$$

$$f_d = \frac{2e^{-\beta(\cancel{\varepsilon_0} + \varepsilon_d - \mu)}}{\cancel{e^{-\beta\varepsilon_0}} + 2e^{-\beta(\cancel{\varepsilon_0} + \varepsilon_d - \mu)}} = \frac{1}{\frac{1}{2}e^{\beta(\varepsilon_d - \mu)} + 1}$$

$$n_d = n_d^{(0)} + n_d^{(+)}$$

↑ ionizált donorok száma

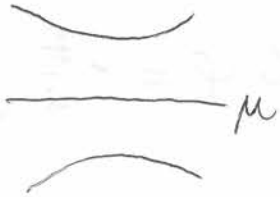
$$n_d^{(0)} = \frac{n_d}{\frac{1}{2} e^{\beta(\mu - \varepsilon_d)} + 1}, \quad n_d^{(+)} = n_d - n_d^{(0)} = \frac{n_d}{1 + 2 e^{\beta(\varepsilon_d - \mu)}}$$

↑ nem szakásos fermi-stat., mert a 4'állapot nem azonos vel.-el jelenik meg

$$n_d^{(-)} = \frac{n_d}{1 + 2 e^{\beta(\varepsilon_a - \mu)}}$$

$$\boxed{n(T) + n_a^{(-)} = n_d^{(+)} + p}$$

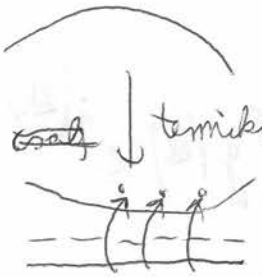
⇒ ha nincs donor és akceptor, akkor μ a két sáv közötti félúton van



• csak donor

• csak akceptor

nagyon magas hőm.-en



kiürül a donorszint

lyukak jelennek meg, ezek vezetnek

Szilárd testek elektronjai külső EM térben

1) Ált. probléma

a) $\mathcal{H}\Psi = \varepsilon\Psi$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 + U(r)$$

- ha $\vec{E}, \vec{B} \to \vec{A}, \varphi$ külső potenciálunk van, akkor már nehezebb megoldani a Schr.-egyenletet

$$\Rightarrow \mathcal{H} = \frac{1}{2m}\Big(\underbrace{\frac{\hbar}{i}\nabla + eA(r)}_{\text{„kinetikus impulzus"}}\Big)^2 + U(r) - e\varphi(r)$$

- ha a potenciál időfüggő, más nem tudjuk egzaktul kezelni

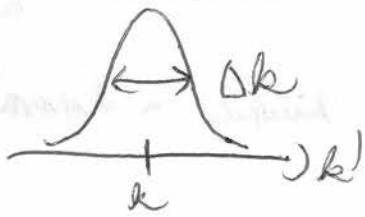
$$\mathcal{H}\varphi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

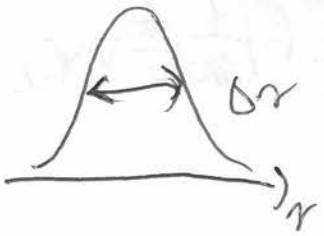
- periodikus potenciál mellett még a homogén tér sem tudjuk egzaktul megoldani!

$\Rightarrow$ (h), $\psi_{nk}(r)$ helyett <u>kváziklasszikus</u> módon közelítünk

hullámcsomag: $\varphi(k,r,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(kr - \varepsilon_k t/\hbar)} \Rightarrow \sum_{k'} g(k') e^{i(k'r - \varepsilon_k t/\hbar)}$

k téren a hullámcsomag alakja $\Leftarrow$





$$\Delta k \cdot \Delta r \simeq 1$$

b) valós térben is egy kiszélesedett hullámfr. van (hullámcsomag).

ha: $\boxed{\Delta k \ll \frac{\pi}{a}} \Rightarrow \boxed{\Delta r \gg a}$

a BZ-ban egy k-val jellemezhető a h. csomag (illetve ennek kis köny.-vel) $k \in (k-dk, k+dk)$

a hullámcsomag kiterjedése $\gg$ a rács

ez nem baj, ha E, B változása λ-val jellemezhető, és $\boxed{\lambda \ggggg a}$ $(\lambda \gg \Delta r)$, vagyis a tér lassan változik (közel konst.) a hullámcsomag helyén

c) Hullámcsomag jellemzése:

$(k, r) \Rightarrow v_k, \; m^*$

terjedési sebi. effektív tömeg

• $v \equiv \dot{r} = \frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, r] = \frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\nabla$

$$v_{nk} = \langle \psi_{nk} | \frac{1}{m}\frac{\hbar}{i}\nabla | \psi_{nk} \rangle = \int \psi_{nk}^*(r) \frac{1}{m} \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla \psi_{nk}(r)\, dr =$$

$$\psi_{nk}(r) = e^{ikr} \cdot u_{nk}(r)$$

$$= \int u_{nk}^*(r) \cdot \frac{1}{m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar k\right) u_{nk}(r)\, dr$$

$$u_{nk}(r) : \quad \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar k\right)^2 + U(r)\right] u_{nk}(r) = \varepsilon_{nk}\, u_{nk}(r)$$

$$u_{n,(k+\Delta k)}(r) : \quad \underset{\text{Hamilton}}{\mathcal{H}} = \left(\frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar k + \hbar\, \Delta k\right)^2 + U(r) = \overset{\mathcal{H}_0}{\mathcal{H}_k} +$$

$$\underbrace{+\frac{1}{m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar k\right)\hbar\, \Delta k}_{\mathcal{H}'} \cancel{+ \hbar^2 (\Delta k)^2}$$

ha Δk kicsi

↳ perturbációszámítás → $\mathcal{H}'$ a pert. potenciál

$$\varepsilon_{k+\Delta k} = \varepsilon_{nk} + \delta\varepsilon_{nk} \qquad \cancel{\delta\varepsilon_{nk} = ?}\text{, ahol}$$

$$\delta\varepsilon_{nk} = \int u_{nk}^*(r) \cdot \frac{1}{m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \hbar k\right) \cdot \hbar\, \Delta k \cdot u_{nk}(r)\, dr$$

$$\Rightarrow \boxed{v_{nk} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial k}} \qquad (v_{nk} \text{ - ra kapott } \int\text{-lól})$$

ha

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow v = \frac{\hbar k}{m} = p$$

d) mozgásegyenlet

$$\left.\begin{aligned} \cdot\ \vec{E}, \vec{B}:\ \hbar k(t) &= -eEt \\ \hbar \dot{k} &= -eE \end{aligned}\right\} \text{klasszikus részecske}$$

állandó erőhatás

→ Bloch-elektron:

$dW = -eE v_{nk}\, dt$ → ennyivel vált. a Bloch-e⁻ energiája

~~(ebben)~~ mivel

$$d\varepsilon_{nk} = \frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial k}\frac{dk}{dt}\cdot dt = \hbar v_{nk} \underbrace{\frac{dk}{dt}}_{\dot{k}} dt$$

$$\Rightarrow \boxed{\hbar \dot{k} = -eE}$$

Bloch-elektronra is igaz a képlet

$$\hbar \dot{k} = -e\underbrace{\left[E + v \times B\right]}_{\text{Lorentz erő}}$$ ha van mágn. tér is (klassz. rész.)

$$\boxed{\hbar \dot{k} = -e\left[E + v_k \times B\right]}$$ Bloch-elektron

c) tömeg:

$$\varepsilon \to \varepsilon_0 + \underbrace{Ak^2}_{\text{legyen}} \to \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \text{ alakú} \Rightarrow A = \frac{\hbar^2}{2m^*}$$

ez definiálja a Bloch-e⁻ rsz. effektív tömegét

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*}$$ → ha inhomogén a tér, kül. eff. tömegek kapok

$$v_{nk} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial k}$$

$$\dot{v}_{nk} = \frac{\partial}{\partial k}\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial k}\right)\cdot\frac{dk}{dt} = \underbrace{\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon_{nk}}{\partial k\,\partial k}}_{\frac{1}{m}}\underbrace{(-eE)}_{F}$$

ennek kéne itt állnia

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon_{nk}}{\partial k^2}$$

$$\varepsilon_{nk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

tehát az előbb definiált eff. tömeg áll itt

$$\Rightarrow \boxed{\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon_{nk}}{\partial k_\alpha\,\partial k_\beta}}$$

effektív tömeg tenzor

e) <u>ha van mágneses tér:</u> (következőkben egy adott sávra (n) számolunk)

$$\hbar\dot{k} = -e\,(v_k \times B) \qquad v_k = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k}$$

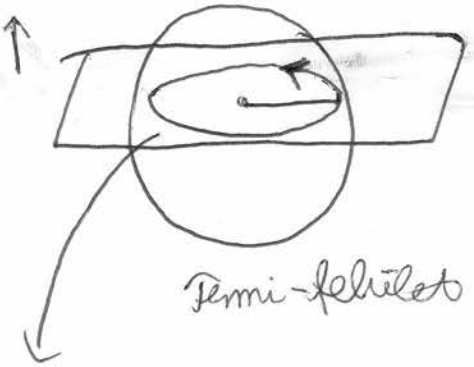
k végpontját tartó síkban

a változás ($d\underline{k}$) a tére merőleges síkban kell lennie

$$\frac{d}{dt}\varepsilon_k = \frac{d\varepsilon_k}{dk}\cdot\frac{dk}{dt} = \hbar v_k\cdot\frac{1}{\hbar}(-e)\underbrace{(v_k \times B)}_{\perp v_k} = 0$$

$\Rightarrow$ a rész. nem vesz fel energiát a mágn. ~~tértől~~ (akárcsak klassz. esetben) $\Rightarrow$ ekvienergiás felületen mozog ($\underline{k}$ is)

• B↑

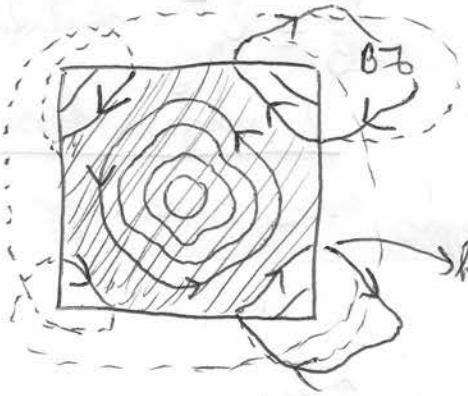


→ k végpontjait tart. x-y sík

Fermi-felület

ha $|k| = k_F$ kerdatben, akkor a két felület metszetén (körvonal) mozog

• ha a Fermi-felület nem gömbfelület:



///: betöltött állapotok

→ ha a Fermi-felület elér a BZ szélét, valójában ott is zárt pályán mozog

ez olyan, mintha egy lyuk mozogna ellentétes irányban

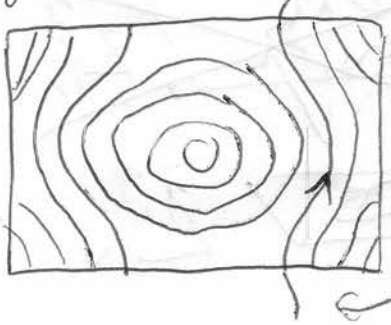
↑ üres állapotokat vesz körbe

↓

akkor mozgatott ellentétesen, ha ellentétes a töltés előjele

$(-e)(v \times B)$

• bonyolultabb eset



ez nem egy zárt pálya lesz!

$$\hbar \dot{k} = -e v \times B$$

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e \frac{d\vec{r}}{dt} \times B$$

$$\hbar \left(k(t) - k(0) \right) = -e \left[r(t) - r(0) \right] \times B$$

↓ ha $\underline{B} \parallel z$ tengely

$$\left(k_x(t) - k_x(0) \right) = -\frac{eB}{\hbar} \left(r_y(t) - r_y(0) \right)$$

$$\left(k_y(t) - k_y(0) \right) = \frac{eB}{\hbar} \left(r_x(t) - r_x(0) \right)$$

$\frac{\hbar}{eB} \equiv l_0^2$ skálafaktor

l_0: mágneses hossz

↓

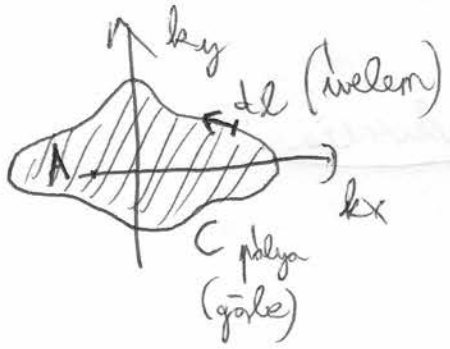
A k térbeli és valós (r) térbeli mozgás ugyanaz, csak egy 90°-os fordítás van a kettő között

(Ha k-térben nem záródik a pálya, akkor valós térben sem, ha -||- záródik, akkor valós térben is

⇒ periodikus k térben ⟺ precesszió valós térben

– a mozgás periódusideje:

$$\hbar \dot{k} = -e v \times B$$



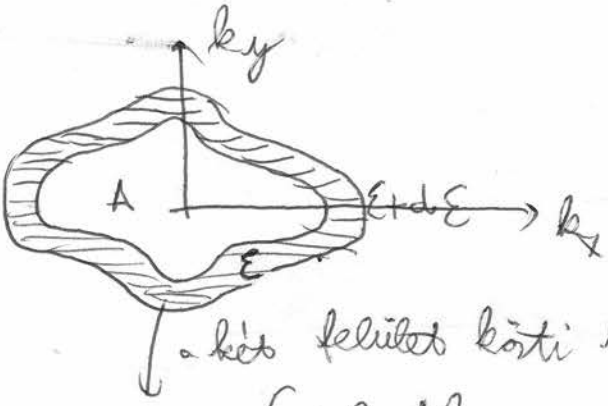
$$dl = \sqrt{(dk_x)^2 + (dk_y)^2}$$

$$\frac{dl}{dt} = \sqrt{\left(\frac{dk_x}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dk_y}{dt}\right)^2}$$

$$\hbar \dot{k}_x = -eBv_y \rightarrow \frac{dl}{dt} = \frac{eB}{\hbar}\sqrt{v_y^2 + v_x^2} = \frac{eB}{\hbar} v_\perp$$

$$\hbar \dot{k}_y = eB v_x \qquad dt = \frac{\hbar}{eB}\frac{dl}{v_\perp}$$

periódusidő: $T_C = \frac{\hbar}{eB}\oint_C \frac{dl}{v_\perp}$



$$dA = \oint dl \cdot dk_\perp$$

$$dk_\perp = \frac{dk_\perp}{d\varepsilon}\cdot d\varepsilon = \frac{d\varepsilon}{\hbar v_\perp}$$

$$dA = \oint dl \cdot \frac{d\varepsilon}{\hbar v_\perp} = \frac{1}{\hbar}\oint \frac{dl}{v_\perp}\cdot d\varepsilon$$

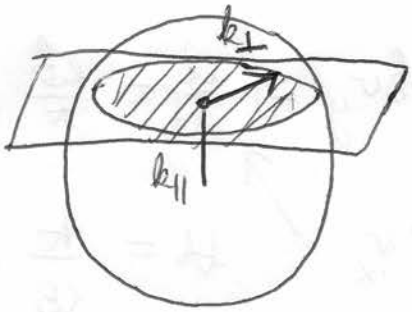
$$\Rightarrow \frac{dA}{d\varepsilon} = \frac{1}{\hbar}\oint \frac{dl}{v_\perp} = \frac{eB}{\hbar^2} T_C$$

$$\boxed{T_c = \frac{\hbar^2}{eB} \cdot \frac{\partial A}{\partial \varepsilon}}$$

$$\boxed{\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)^{-1}}$$ ciklotron frekvencia

· pl. szabad elektronra

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m}$$



$$A = k_\perp^2 \pi$$

$$A = \pi \cdot \left[\frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon - k_\parallel^2\right]$$

$$\frac{\partial A}{\partial \varepsilon} = \pi \cdot \frac{2m}{\hbar^2}$$

$$\underline{\underline{\omega_c}} = \frac{\cancel{2}\cancel{\pi} eB}{\cancel{\hbar^2}} \frac{\cancel{\hbar^2}}{\cancel{2}m\cancel{\pi}} = \underline{\underline{\frac{eB}{m}}}$$

· nem szabad el.-re:

$$\omega_c = \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar^2}\left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)^{-1}}_{:= \frac{1}{m_c}} \cdot eB = \frac{eB}{m_c}$$

m_c : ciklotron tömeg

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi}\left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)$$

disp. relációból számolható

→ Ha parabolikus disp. van effektív tömeggel, akkor

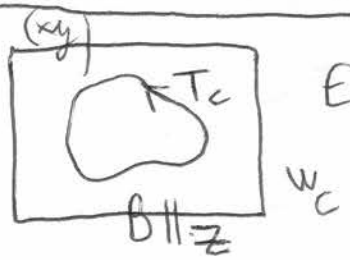
$$m_c = \underbrace{m^*}_{\text{eff. tömeg}} \quad \text{lesz}$$

→ ha anizotrop az eff. tömeg tensor, akkor m_c függ attól, hogy $\underline{B}$ hogyan áll be a tensor főtengelyhez képest.

⇓

ha m_c-t megmérjük ($\underline{B}$ irányát változtatva), akkor abból m^*-ra következtethetek!

f) <u>Váltakozó elektromos tér + szinusz. mágn. tér</u>



$$\hbar\dot{k} = -e\left[\underset{E(w)}{E} + v \times B\right]$$

$$E(w) = E_0 e^{iwt}$$

<u>ciklotron rezonancia</u> szándékja kényszeríteni az e^--t, hogy w frekvenciával menjen a pályán (kényszerenergiás)

- ha $\underline{w = w_c}$ → fázisban van a gerjesztéssel, gyorsítóenergiát tud felvenni a térből, ekkor van <u>max. abszorpció</u>
- ha $w \neq w_c$ (nagyon eltérnek) ⇒ nem tud felvenni energiát
- ha van a Bloch e^--nak egy véges élettartama (ütközőnek):

ha $\boxed{w\tau \gg 1}$ ($\tau \gg T_c$), akkor lehetséges rezonancia, egyébként ha kicsi τ, akkor nem

ha B-t hangolom, és ω fix, akkor

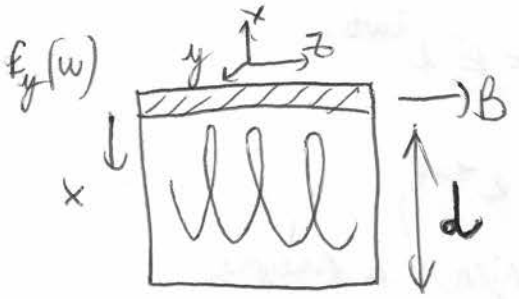
ω_c-t ~~hangolom~~ állítom be ω-hoz képest

(de ugyanúgy lesz rezonancia)

BAJ: ha fémes az anyag, az mikrohullámú tér (ami ω_c-nek felel meg) nem hatol be a skin-eff. miatt

⇓

<u>Azbel-Kaner rezonancia</u>



///: $E_y(\omega)$ csak a felületen van

↓ mindig csak a felületen kap egy lökést az e^- az el. térből

de csak akkor tudja gyorsítani, ha mindig ugyanabban a fázisban van az el. tér, amikor az e^- a felülethez ér

$\Rightarrow T_c = T_e \cdot n$

$$\boxed{\omega_e = n \cdot \omega_c} = n \frac{eB_n}{m_c}$$

$\forall n$-hez egy B_n tartozik, amit megtöltenek a geometria

⇒ több rezonáns tér is van

Mi van, ha gyengítjük a B-t?

Nő a ciklotron pálya sugara, és véges mintán elérheti az anyag szélét

↓

megszűnik a rezonancia

↓

van egy méretefektus is

Ha ~~megszűnik~~ ismert d, akkor tudjuk, hogy mekkora térnél éri el r_c (pályasugár) $\frac{d}{2}$-t ⇒ r_c és a hozzá tartozó B-ből a Fermi-felületre lehet következtetni.

↓ l_0

. óra

0) Ism.: mágneses térben való mozgás:

$T_c \Rightarrow \omega_c = \frac{eB}{m_c^*}$ ciklotron frekvencia

• izotr.: $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow m^* = m_c$

• anizotr.: $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*} \Rightarrow m_c$ kül. lehet

Síkhullám-csomaggal számoltunk

$\boxed{\Delta k < \frac{\pi}{a}}$

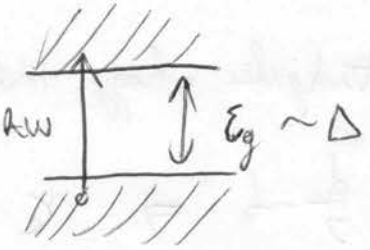
$\Delta x \gg a$

$\underline{E}, \underline{B}$: $\boxed{\lambda \gg \Delta x \gg a}$ hosszú hullámhosszú közelítés

Térben gyorsan változó EM tér a kváziklasszikus közelítés nem működik !!!

$\underline{w}$, $\underline{E}$, $\underline{B}$ ⇒ ezekre kapunk ~~feltételeket~~

ε_g sávból válasszuk ki a síkhullámainkat



($\square$: ~~feltételek~~ a kváziklas. közelítéshez)

ahhoz, hogy az EM tér fotonja ne tudjon másik sávba felgerjeszteni (ami elrontaná a kváziklas. ~~közelítést~~),

$$\boxed{\hbar w < \varepsilon_g}$$

$$\boxed{\underbrace{eE \cdot a}_{\text{elektr. ~~EM~~ térből felvehető}} < \frac{\varepsilon_g^2}{\varepsilon_F}}$$

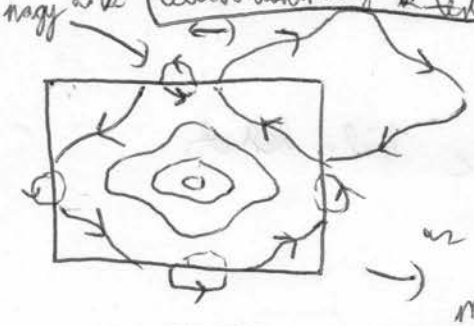
karakt. energia

$$\boxed{\underbrace{\hbar w_c}_{\text{mágn. ~~térből~~}} < \frac{\varepsilon_g^2}{\varepsilon_F}}$$

felvehető karakt. energia

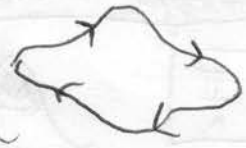
- ha $U \neq 0$:

ha nagy a $\vec{k}$ ~~illetve a hatványt k téren~~



hurok jellegű pálya

az e^- $\vec{k}$ téren ezeken a pályákon megy, ha $|\vec{k}|$ nagy:

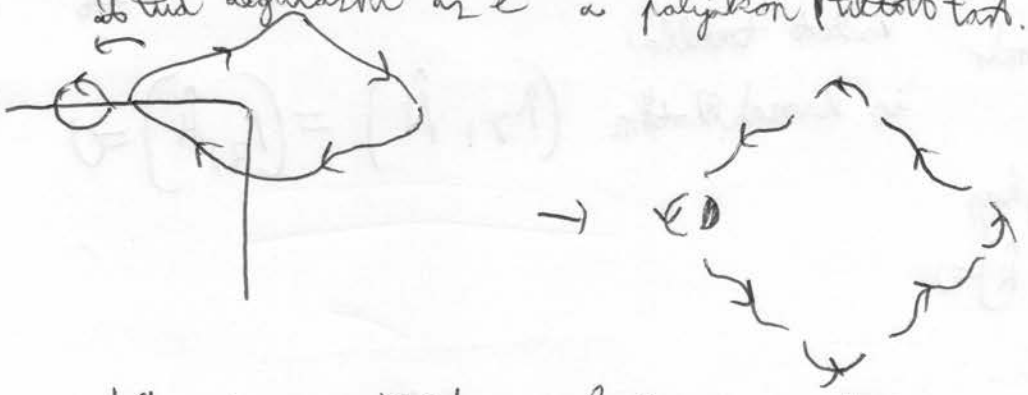


ciklotron pálya

BZ

1) Mi van, ha megváltjuk a $\hbar\omega < \varepsilon_g$ vagy $\hbar\omega_c < \frac{\varepsilon_g^2}{\varepsilon_F}$ feltételeket? (nagy B tér)

tud alagutazni az e^- a pályákon (tiltott tart.-on)!



megváltozik a ciklotron frekvencia!

Olyan, mintha ~~az kezdeti~~ megint köpályán menne az e^-

→ nem érzi a ~~gyg~~ mágneses térhez képest gyenge potenciálto!

2) Landau: Meg tudjuk-e oldani a Schr.-egyenletet $B \neq 0$ térben?

szabad e^-, $B \neq 0$ ⇒ Bloch e^-, $B \neq 0$ (nem kvázi-klasszikus közelítés)

a) szabad e^-:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) = \varepsilon\,\psi(r)$$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + eA\right)^2\psi(r) = \varepsilon\,\psi(r)$$

(Landau-mérték)

$B = \text{const.}$ → $\boxed{A = (0, Bx, 0)}$

→ $A = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$ (szimm. mérték)

} kül. mértékben

ezt használjuk!

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + eBx\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right)^2\right]\psi(x,y,z) = \varepsilon\cdot\psi(x,y,z)$$

$e^{ik_x x}$ $\quad \underbrace{e^{ik_y y}\, e^{ik_z z}}$ $\quad p_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$, $p_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$

↑

~~[illegible]~~ már nem igaz, hogy $(p_x, \hat{H}) = 0$

szép tabella is használhatóan $(p_y, \hat{H}) = (p_z, \hat{H}) = 0$ ✓

$$\Rightarrow \quad \Psi(x,y,z) = u(x)\, e^{ik_y y} \cdot e^{ik_z z}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}(\hbar k_y + eBx)^2 + \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2\right] u(x) = \varepsilon\, u(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\underbrace{\left(\frac{eB}{m}\right)^2}_{\omega_c^2}\Big(x + \underbrace{\frac{\hbar}{eB}k_y}_{x_0 := -\frac{\hbar}{eB}k_y}\Big)^2\right] u(x) = \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right) u(x)$$

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 (x - x_0)^2\right]} u(x) = \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right) u(x)$$

ω_c frekv.-jú harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora, mely x_0 körül szeg!

$$u(x) \sim \underbrace{(\ldots)}_{\text{norm. faktor}} \cdot \underbrace{H_n(x)}_{\text{Hermite-polinom}}\, \overbrace{e^{-x^2/\ldots}}^{\text{exp. tag}}$$

és

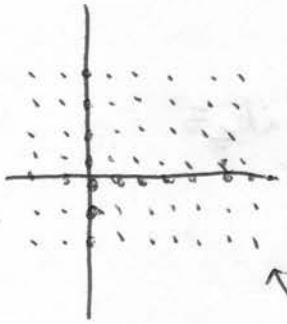
$$\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

$$\varepsilon = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

z irányban változatlanul halad az e^-, x-y síkban ~~körpályán mozog~~ szerg ω_c frekv.-val

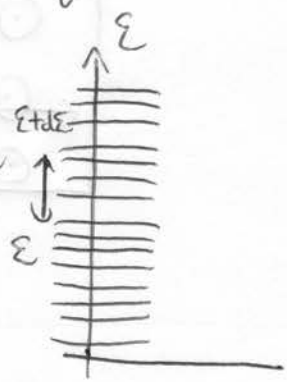
2D elektron gáz a:

- $B=0$



$\frac{2\pi}{L_x}, \frac{2\pi}{L_y}$ $\quad \varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ $\quad k^2 = k_x^2 + k_y^2$

a szabad e^- $(B=0)$ megoldásai



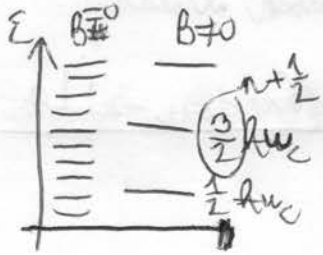
$$\rho(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)\cdot\underbrace{\frac{1}{F}}_{\text{felülettel normálva}} =$$

$$= \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\,\delta(\varepsilon-\varepsilon_k) = \int \frac{2\pi k\,dk}{(2\pi)^2}\,\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) =$$

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m} := x \qquad = \frac{m}{\hbar^2 2\pi}\cdot\underbrace{\int dx\cdot\delta(\varepsilon - x)}_{1}$$

$$\rho_{2D}(\varepsilon) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$$ konstans az állapotsűrűség

- $B\neq 0$



→ hogy lehet ennyivel kevesebb energiaszint? $\varepsilon = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$

↓

↳ degeneráltak az en. szintek!

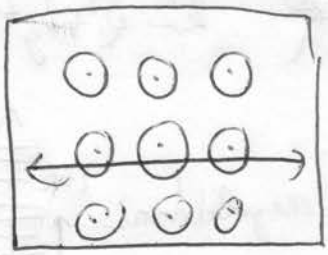
kell lennie még egy kv. számnak, ami eszközt indexeli!

De tudjuk is, hogy van: k_y (n és k_z -n kívül)

$$-\frac{\hbar}{eB}k_y = x_0$$

x_0 indexeli a degenerált állapotokat! →

kül. középponttól oszcillátorok a valós térben!



L_x

$$u_n(x)\, e^{ik_y y} \cdot e^{ik_z z}$$

$$0 \le x_0 \le L_x$$

$$0 \le \frac{\hbar}{eB}|k_y| \le L_x$$

$$0 \le k_y \le L_x \cdot \frac{eB}{\hbar} \quad / : \frac{2\pi}{L_y}$$

$$\underbrace{\frac{\frac{eB}{2\pi\hbar}}{\frac{eB}{\hbar}}}\, L_x L_y = \boxed{\frac{eB}{h} F = N_p}$$ degeneráció foka

$\frac{h}{e} = \Phi_0^*$ → fluxuskvantum normális e^--okra (szupravez. -re $\frac{h}{2e}$, ...)

tényleges fluxus (ami a mintán áthalad)

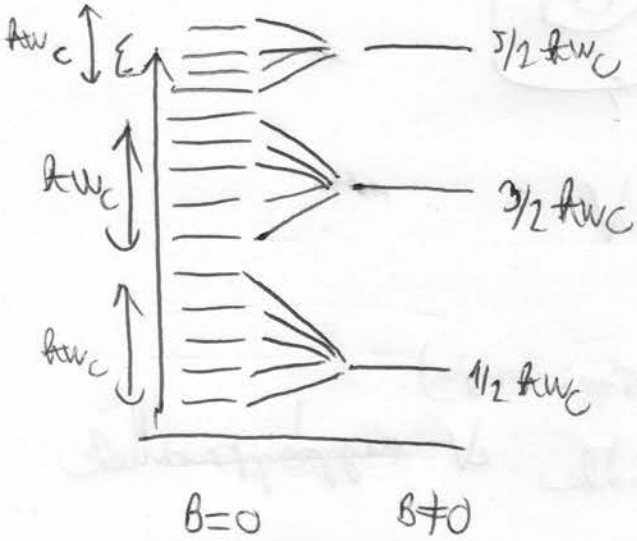
$$\boxed{N_p = \frac{B \cdot F}{\Phi_0^*}}$$ → ez adja meg a Landau-nívók degenerációt

fluxuskvantum

$$\underbrace{\rho_{2d}(\varepsilon)}_{\text{szabad } e^- \text{ állapotsűr.-e}} \cdot \overbrace{\hbar\omega_c}^{d\varepsilon} = \frac{\cancel{m}}{2\pi\hbar} \cdot \frac{eB}{\cancel{m}} = \underbrace{\frac{eB}{h}}_{\text{ez a Landau nívók deg.-ja}} \quad (/F)$$

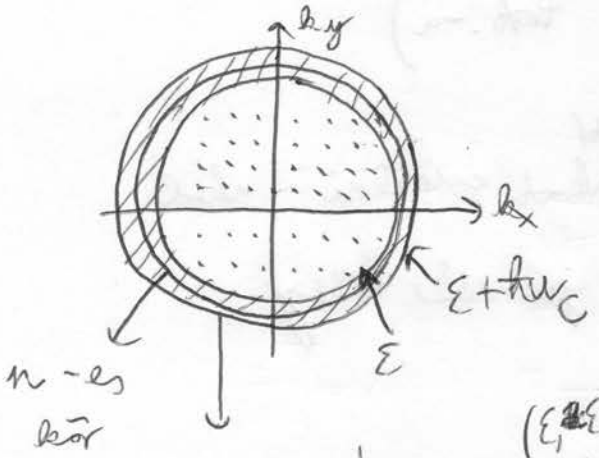
$\Downarrow$

itt van egy extra kv. szám, k_y (x_0)



a $\hbar\omega_c$ tartományban levő nívók összeesnek, degeneráltak lesznek

Hol vannak $\vec{k}$ térben ezek az állapotok?

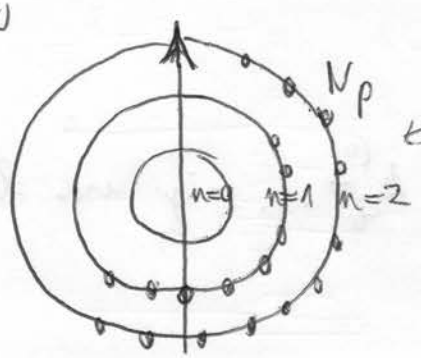


/// tartományban N_p állapot van

$(\varepsilon, \varepsilon+\hbar\omega_c)$ gyűrűben ~~tart. ban~~

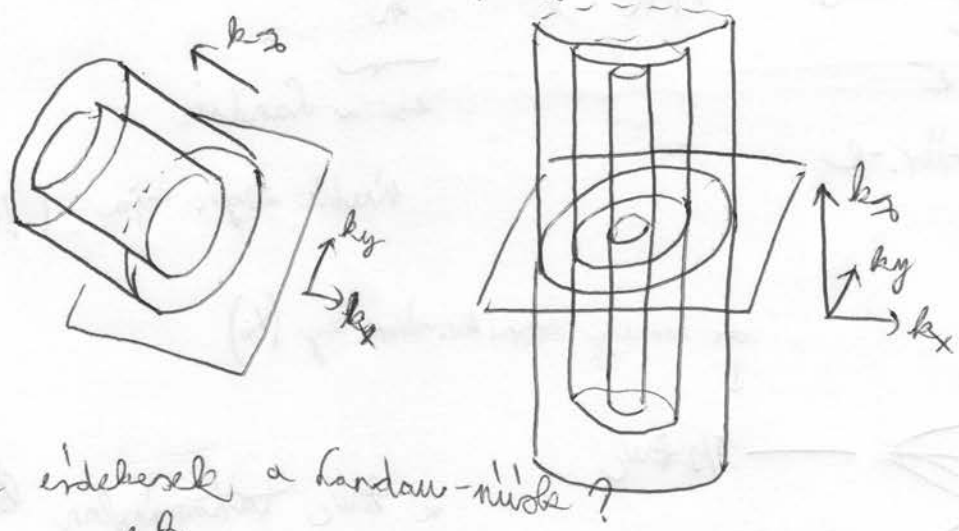
ezek az állapotok degenerálódnak a n indexű körök

$\downarrow$



ezeken a körökön lesznek az állapotaink

ha 3D-ben nézzük, k_z is kvantumszám



– Meddig érdekesek a Landau-nívók?

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \qquad 1T \sim 10^{-4}\,eV$$

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

(Fermi-energia)

• fémeknél a karakt. energiák eV nagyságrendűek

$\Rightarrow n \sim 10^4$ → a Fermi-energia alá ennyi Landau-nívók

(ez már a kváziklasszikus közelítés tart.-a)

• félvezetőknél lehet olyan kísérleteket/mintákat csinálni, ahol csak a legalsó Landau-nívók jelennek meg

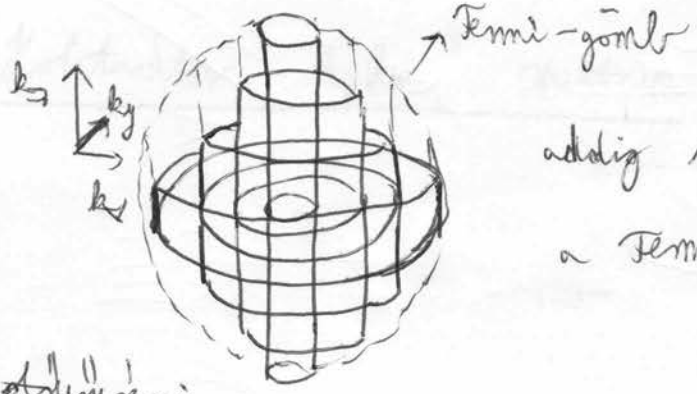
– Meddig van betöltve?

$$\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} < \varepsilon_F$$

pl. $n=0$ $\quad 1/2\,\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \varepsilon_F \rightarrow k_z^{(0)} = \ldots$ -ig van betöltve

$n=1 \quad k_z^{(1)} < k_z^{(0)}$

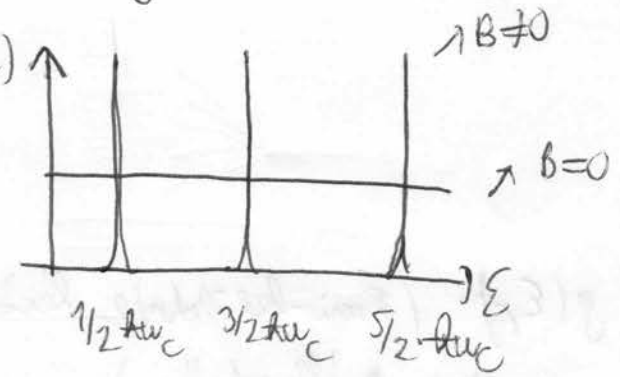
↳ egyre alacsonyabb k_z-ig vannak betöltve a csövek!



addig van betöltve, amennyi belefér a Fermi-gömbbe!

– állapotsűrűség:

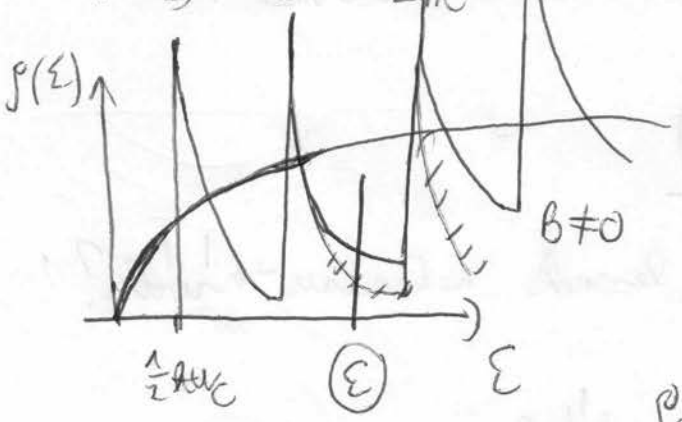
• $\rho(\varepsilon)$



⇒ kis B-nél a δ-kat ki lehet átlagolni

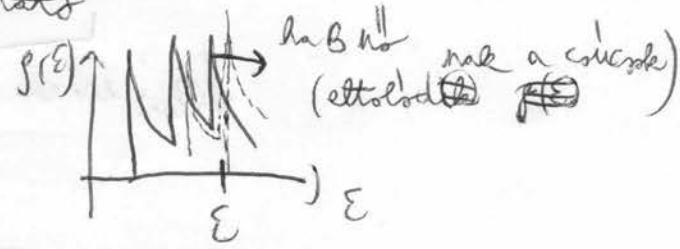
• 3D:

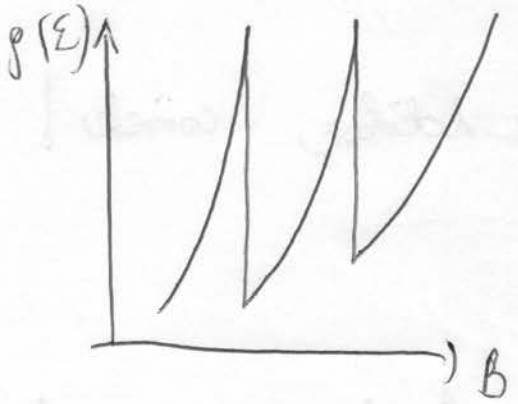
$$\varepsilon = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$



$$\rho_{3d}(\varepsilon) \sim \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c}}$$

• Mi van, ha B-t ~~változtatjuk~~ beállítjuk, adott ε energiára?





Láttuk, hogy $c_V, \chi \sim \rho(\varepsilon_F)$ (Fermi-felületnek levő (B≠0 esetben) állapotsűr.)

→ c_V, χ periodikus változásából lehet következtetni a mágneses tér nélküli Fermi-felületre!

b) <u>Nem szabad e^- $(U \neq 0)$</u>

$\mathcal{H}\psi_k = \varepsilon_k \psi_k$ Mik lesznek a Landau-nívók?

$B=0$

<u>Wannier-tétel</u>

$B \neq 0$ $\varepsilon(k) = ?$: $\underbrace{\varepsilon(-i\nabla)} \cdot \psi(r) = \varepsilon_k \cdot \psi(r)$

Áll.: ennek az operátornak pont ε_k lesz a s.érteke

pl. $\varepsilon_k = \cos(kx)$

$$\mathcal{H}_{eff} = \cos\left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

<u>Biz.:</u>

$$\varepsilon_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_i} c_i e^{ikR_i}$$

$$\varepsilon(-i\nabla) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_i} c_i e^{R_i \nabla}$$

$$\varepsilon(-i\nabla)\cdot\psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_i} c_i \underbrace{e^{R_i\nabla}}_{\left(1 + R_i\nabla + \frac{1}{2}(R_i\nabla)^2 + \ \right)} \cdot \psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_i} c_i \psi(r+R_i) = \overbrace{\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_i} c_i e^{ikR_i}}^{\varepsilon_k} \cdot \psi(r) =$$

$$\psi_k(r) = \psi_k(r+R_i) \rightarrow \text{eltolja a fr.-t}$$

Taylor-sorfejtés

$$= \varepsilon_k \psi_k(r) \ \checkmark$$

Most $B \neq 0$ lehet:

$$\varepsilon_k \Rightarrow \varepsilon(k) = \varepsilon(-i\nabla) = \varepsilon\left(\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e\mathbf{A}\right)/\hbar\right)$$

$$\cos kx \Rightarrow \cos\left(\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + eA_x\right)/\hbar\right)$$

$\rightarrow$ <u>„Hofstadter-lepke" spektrum</u>

Majdnem szabad e^--ra:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*}$$

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{1}{2m_x^*}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + eA_x\right)^2 + \frac{1}{2m_y^*}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + eA_y\right)^2 + \dots$$

→ ugyanaz végigszámolható, csak kül. ω_c-jű Landau nívók jelennek meg

(A: $\vec{k}$ térben kötött tömeg)

kváziklassziku közelítés:

$\boxed{n \gg 1}$ $\omega_c = \frac{2\pi e B}{\hbar^2}\left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)^{-1}$ ← ált. zárt pályán mozgó e^- cirkulon frekv.-ja (látjuk)

$$\hbar\omega_c = \frac{2\pi\hbar B}{\hbar}\left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)^{-1} = \underbrace{\varepsilon(n+1) - \varepsilon(n)}$$

kvantálás: az energiák kül.-e csak $\hbar\omega_c$ lehet

$$\frac{\partial A}{\partial \varepsilon} = \frac{A(n+1) - A(n)}{\varepsilon(n+1) - \varepsilon(n)}$$

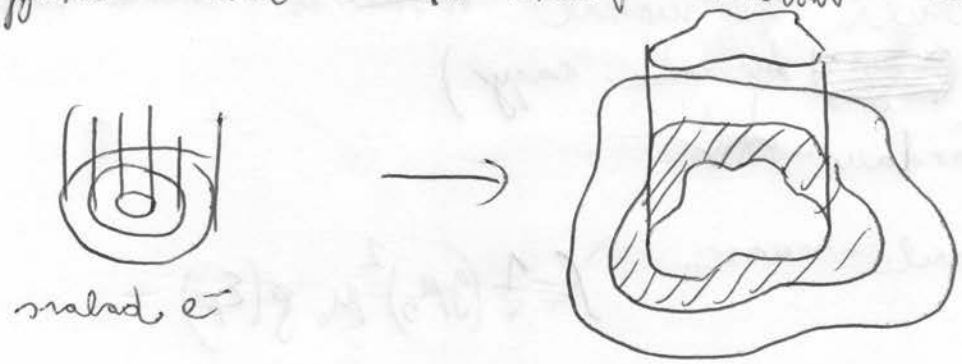
↓

$$\frac{2\pi e B}{\hbar}\,\frac{\cancel{\varepsilon(n+1) - \varepsilon(n)}}{A(n+1) - A(n)} = \cancel{\varepsilon(n+1) - \varepsilon(n)}$$

$$A(n+1) - A(n) = \frac{eB}{\hbar} = \frac{B}{\Phi_0^*}$$

A $\vec{k}$ térbeli pályák olyan kell legyenek, hogy a szomszédos amikre szétdegenerálódnak a $B=0$ nívók

gyűrűk által bezárt terület kvantált kell legyen



$T_{\parallel} = \hbar\omega_c$

itt is Landau-csövek lesznek, csak az alapjuk nem kör, hanem a Fermi-felülettel igazodó (záró) alakzat

1. óra

1) múlt órán láttuk: e^- mágneses térbe helyezve

DE a spint nem vettük figyelembe!

(emlékeztető: $k_x, k_y, k_z \to k_y, k_z, n$

$$E = (n+1/2)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

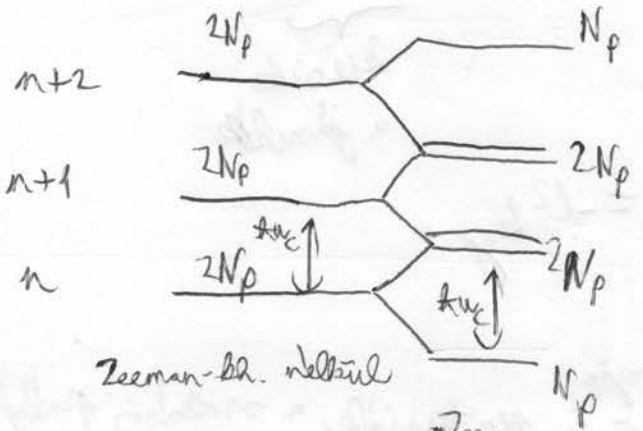
$$N_\rho = \frac{eB}{h} L_x L_y$$

(↑)(↓))

$$\Delta E = -g\mu_B \sigma B \simeq \frac{\hbar\omega_c}{2}$$

$g \simeq -2$ $\quad \omega_c = \frac{eB}{m_c}$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ (l. múlt óra)



⇒ lényegében ugyanaz a sávszerkezet (spektrum) látom ($2N_\rho$ betölt., $\hbar\omega_c$ külön.), de az alapállapot (legalsó Landau-nívó) csak N_ρ-x-en betöltött!

⇒ spin nélküli spektrummal ~~[illegible]~~ is számolhatunk
(ha n [illegible] kv. szám nagy)

2) $\underline{\chi}$: pálya → Landau-nívó

spin → Pauli-szusz.

$$\chi = \frac{1}{4}(g\mu_B)^2 \mu_0 \, g(\varepsilon_F)$$

a) Landau-nívók milyen szusceptibilitást adnak?

körpályán mozgó e^--ok → diamágneses járulék $\chi = - \ldots$

szabad e^- nem veszi fel energiát a tértől

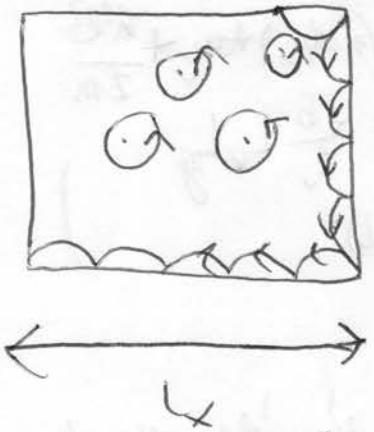
$E(B) = E_0$

$M = -\frac{\partial E}{\partial B} = 0$

$\chi = 0$

↓

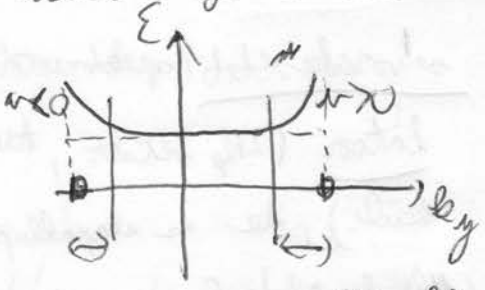
Melyik az igaz?



a minta szélén levő atomok járuléka ellentétes a többi e^--okkal (ellentétes irányú pályát járnak le)

⇒ $\chi = 0$

szélen mozgó e^--ok

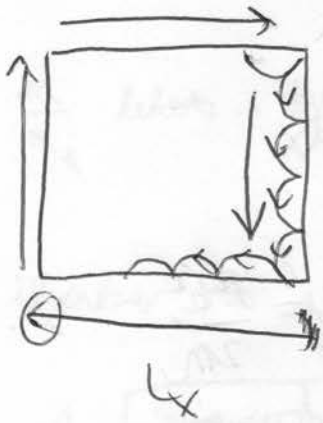


kiesik a járulék

$x_0 = -l_0^2 k_y$

itt nagyobb az energia mint a szélen levő e^--ok nem tudják a szokásos pályát bejárni

$$\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_y} = v_y$$



el menti állapotok

↓

- (klasszikusan is értelmezhető)
- ezek adják a kvantumos Hall-effektust (kvantált vezetőképesség)

b) Kvantumos szusc. számolás:

$$E(B) \Rightarrow M \Rightarrow \chi$$

$$E = V\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \cdot \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon \quad \rightarrow \quad \rho_n(\varepsilon) = ?$$

$$\rho_n = \frac{dN_n(\varepsilon)}{d\varepsilon}$$

$N_n(\varepsilon) \Rightarrow$ n. Landau-nívó alatt hány állapot van

$$dN_n(\varepsilon) = 2N_\phi \cdot dk_z \cdot \frac{L_z}{2\pi}$$

$[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$

$$dk_z = \frac{dk_z}{d\varepsilon}\, d\varepsilon$$

$$\left(\frac{2\pi}{L_z}\right)$$

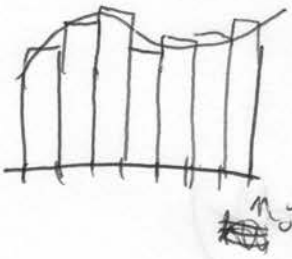
$$k_z = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left[\varepsilon - \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right]} \leftarrow \varepsilon = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar k_z^2}{2m}$$

$$\rho_n(\varepsilon) = \frac{1}{V} 2N_\phi \cdot \frac{L_z}{2\pi} \cdot \frac{dk_z}{d\varepsilon}$$

$$\rho_n(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c}}$$

$$\rho(\varepsilon) = \sum_n \rho_n(\varepsilon)$$

$$E = N_e \cdot \varepsilon_F - \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \hbar\omega \sum_{n=0}^{n_{max}} \left(\varepsilon_F - (n+1/2)\hbar\omega_c\right)^{3/2}$$



$n_0 + \frac{1}{2}$

$$\sum_{n=0}^{n_0} f(n+1/2) \approx \int_0^{n_0+1/2} f(x)\,dx$$

$$\boxed{E = \frac{3}{5} N_e \cdot \varepsilon_F} \leftarrow \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$E = \sum_{|k| < k_F} \varepsilon_k$$

— gyakorlat

- (Euler – Maclaurin) $\rightarrow \sum_{n=0}^{n_0} f(n+1/2) = \int_0^{n_0+1} f(x)\,dx - \frac{1}{24}\left[f'(n_0+1) - f_0(0)\right]$

$$E = \frac{3}{5} N_e \cdot \varepsilon_F + \frac{V}{24\pi^2}(eB)^2 \frac{k_F}{m}$$

$$M = -\frac{\partial E}{\partial B} \qquad \boxed{\chi_L = -\frac{\mu_0 e^2 k_F}{3m}\frac{1}{(2\pi)^2}} = -\frac{1}{3}\mu_0 \mu_B^2 \rho(\varepsilon_F)$$

ha $m = m_{szabad\ e^-}$

$$\chi_P = \frac{1}{4}(2\mu_B)^2 \mu_0 \rho(\varepsilon_F) \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \qquad \rho(\varepsilon_F) = \frac{k_F m}{\hbar^2 \pi^2}$$

$$\underset{\text{(Pauli)}}{\chi_P}(g = -2) = \mu_B^2 \mu_0 \cdot \rho(\varepsilon_F)$$

— szabad e^--ra: $\chi_P + \chi_L = \frac{2}{3}\mu_0 \mu_B^2 \rho(\varepsilon_F) \rightarrow$ paramagn.

$\forall$ ilyen rsz.

— nem szabad e^--ra

ρ-ban az effektív tömeg jelenik meg!

$$\Rightarrow \boxed{\chi_L} = -\frac{\mu_0 e^2 k_F}{3m^*}\frac{1}{(2\pi)^2} = \boxed{-\frac{1}{3}\mu_0 \mu_B^2 \cdot \rho(\varepsilon_F) \cdot \left(\frac{m}{m^*}\right)^2}$$

$\frac{m}{m_*}$ lehet $\neq 1$, akár 3-nál nagyobb is $\left(m_* < \frac{m}{3}\right)$

ilyenkor $|\chi_L| > |\chi_p|$ ⇒ diamágneses anyagok

pl. $\boxed{\text{Bizmut}}$

• ez az állapotsűrűség nem egy oszcillátor állapotsűrűsége

→ valamit még mindig kihagytunk

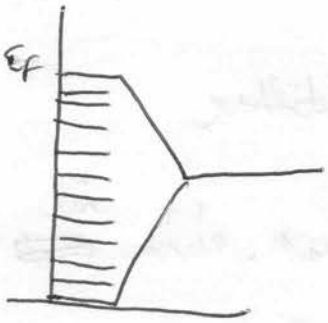
$\boxed{2D}$

$$E = (n+1/2)\hbar\underbrace{\omega_c}_{k_z \text{ nincs } (2D)} \qquad N_p = \frac{eB}{h} L_x L_y$$

$(N_e)^{\text{dér}}$ $\bar{e}$: $\frac{eB_0}{h} L_x L_y = N$ → legyen ilyen B_0

$n=0$ LL (Landau-level = tele Landau-nívó)

$n \neq 0$ LL üres

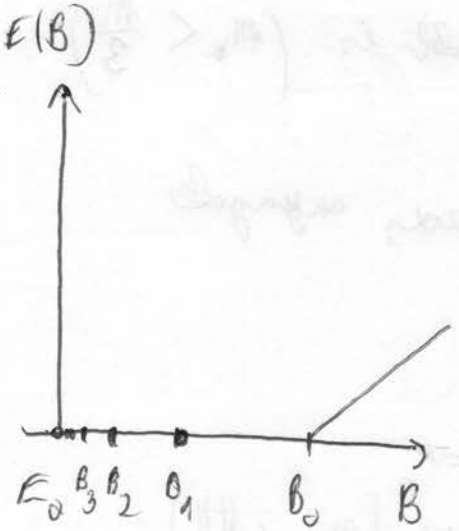


$$\frac{1}{2}\hbar\omega_c(B_0) = \frac{\varepsilon_F}{2}$$

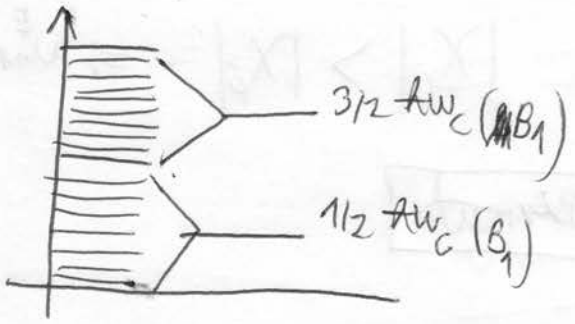
Mekkora a sz. energiája B_0-nál?

nagyon, mivel mágneses tér nélkül, mert $\rho(\varepsilon) = \text{konst.}$

⇒ a nívók felének energiája nőtt, felének csökkent ⇒ átlag nem vált.



• $B_1 = \frac{B_0}{2}$



$$\underbrace{\frac{2eB_1}{h}}_{\frac{eB_0}{h}} L_x L_y = N_e$$

⇒ ugyanannyi az energia, mint ~~ellen~~ ~~tér~~ nélkül

• ált. lan, ha $B_n = \frac{B_0}{(n+1)}$:

$$(n+1)\frac{eB_n}{h} L_x L_y = N_e = \frac{eB_0}{h} L_x L_y$$

• ha $B_n < B < B_{n-1}$

⇒ nincs betöltve az összes nívó (a betöltés függ B-tól)

$l = 0, 1, 2, \dots (n-1)$ ~~tele~~

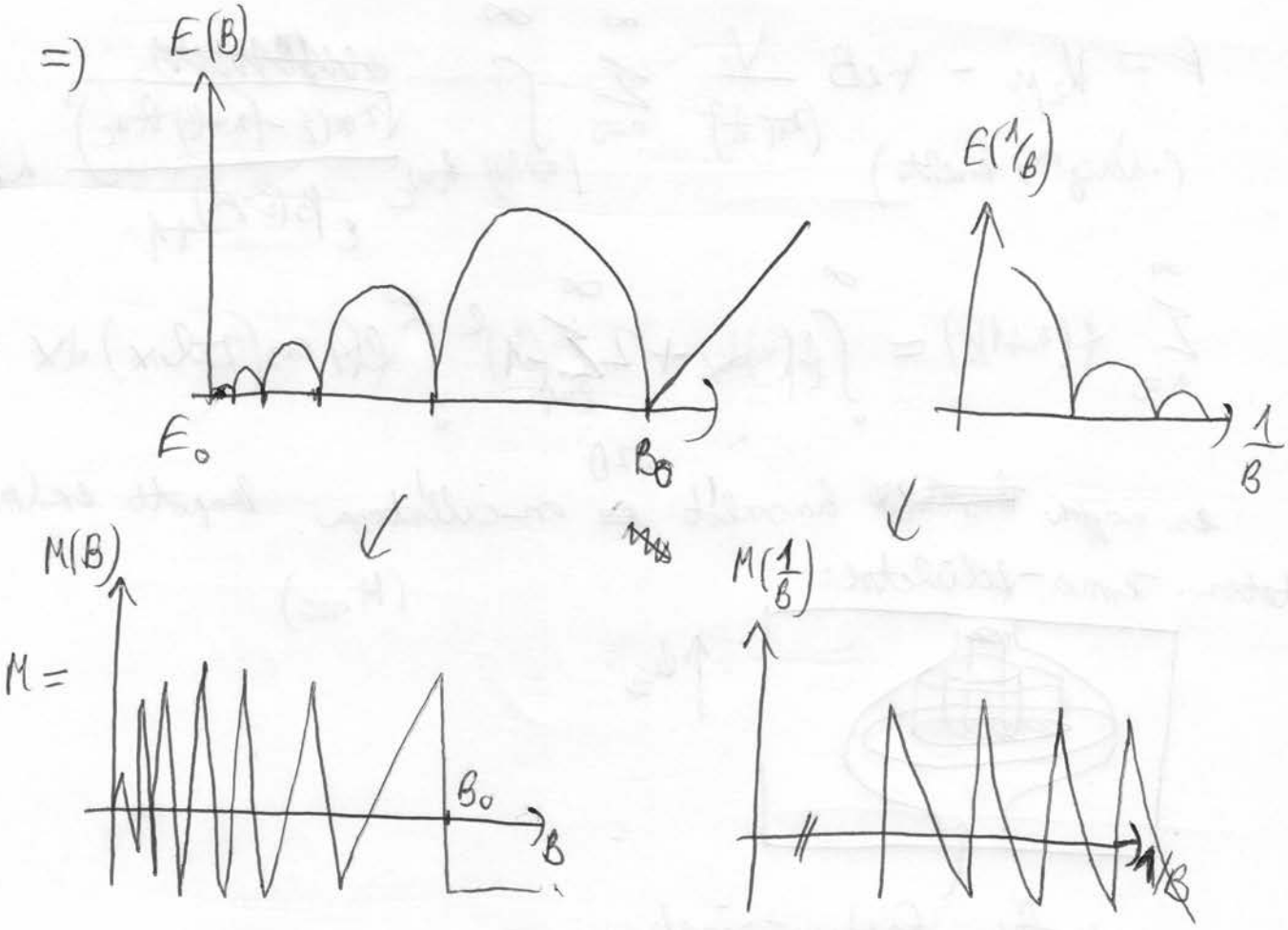
n ~~sorban~~ lán betöltve

$l > n$ üres

$$E(B) = N_p \cdot \sum_{l=0}^{n-1} \left(l + \tfrac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \underbrace{\left(\overbrace{N_e - n \cdot N_p}^{\text{a maradék az n. nívóra ül rá}}\right)}_{\text{az alsó szinteken ennyi e van}} \left(n + \tfrac{1}{2}\right) \cdot \hbar\omega_c =$$

$$= N_e \hbar\omega_c (n+1/2) - \frac{1}{2} N_p \hbar\omega_c \underbrace{n(n+1)}_{\text{parabola}}$$

$\Rightarrow$



$\boxed{3D}$ konvolúcióval a szorzás

$\rightarrow$ eredmény:

$$M_{osc} = (\qquad) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l^{3/2}} \sin\left(2\pi l \underbrace{\frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c}}_{\sim \frac{1}{B}} - \frac{\pi}{4}\right)$$

$\omega_c \sim B$ $\qquad$ $l=1$ dominálja

$\Rightarrow$ $1/B$ tr.-ben van egy oszcilláló komponens

Véges hőm.-eten ~~(tiszta szorzás)~~: nagykanonikus eloszlásból Euler-M. formula korrekciója

$$\Omega = -kT \sum_i \ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right) \qquad \varepsilon_i = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$i = (n, k_z)$$

$$F = \Omega + \mu N = N_e \mu - 2kT \frac{eB}{h} L_x L_y \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k_z} \ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n,k_z)-\mu)}\right)$$

$$F = N_e \mu - 4eB \frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n+1/2)\hbar\omega_c}^{\infty} \frac{\sqrt{2m(\varepsilon - (n+1/2)\hbar\omega_c)}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \, d\varepsilon$$

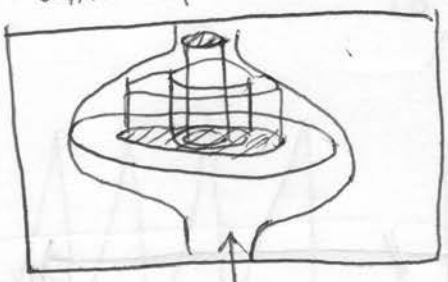
(addig míg kmelbb)

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n+1/2) = \int_0^{\infty} f(x)\,dx + 2\sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \int_0^{\infty} f(x) \cos(2\pi l x)\,dx$$

ez nagyon ~~hasonlít~~ hasonlít a 2D oszcillátorra kapott eredmény

~~tetsz.~~ Fermi-felületre

(M_{osz})



$\uparrow k_z$

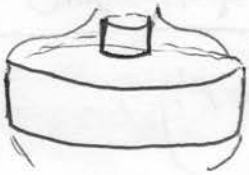
~~adott k_z~~ Landau-csövek

ha B nő, a csövek megkisznak → kiszorulnak a Fermi-felületből ⇒ már csak egyszerű cső (Landau-szint) kerül be

∀ magasságban levő réteg (adott B-re) más-más periodicitást (ω_c) ad

↓

de ez nem folytonosan változik, mert a csövek kvantálva vannak ⇒



} ezek a k_z-k ugyanazt a periodicitást adják

(átlagolt mérésterület)

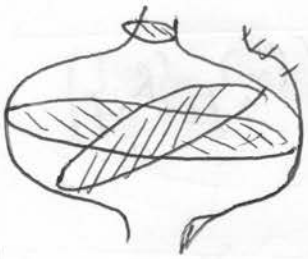
⇒ az összeget (f-ben) a „has" és a „nyak" dominálja

⇒ a periódusból (frekvenciából) -ból vissza ~~tudok~~ következtetni a metszet(ek) területére

$$\sin\left(2\pi l \frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) = \sin\left(\frac{e\hbar A}{eB} - \frac{\pi}{4}\right)$$

metszet területe

ha más k_z-re (más irányú tére) mérjük, más irányú metszetet kapunk



→ kimérhető a Fermi-felület!

hőmérsékletfüggő ~~(periódusidő)~~ amplitúdó:

$$\frac{2\pi^2 l \left(k_B T / \hbar\omega_c\right)}{\operatorname{sh}\left(2\pi^2 l k_B T / \hbar\omega_c\right)} \ll 1$$

ekkor igaz a közelítés

⇓

$\lesssim 1K$ hőmérsékleten kell a mérést végrehajtani, ekkor van mérhető folyamat

ahhoz, hogy a de Haas-van Alphen effektus tisztán látható legyen, az e^--nak legalább 1-szer körbe kell futnia a ciklotron pályán ⇒ szabad mozgás ideje $\geq T$ (periódusidő)

Born-Oppenheimer-közelítés, e^--ph. kh.

1) Eddig ~~A~~ külön kezeltük az ionok és elektronok problémáját

$$\left.\begin{aligned} \underline{\mathcal{H}_{ion}} &= \mathcal{H}_{ion}^{kin} + \mathcal{H}_{ion-ion} \\ \underline{\mathcal{H}_{el}} &= \mathcal{H}_{el}^{kin} + \underbrace{\mathcal{H}_{el-el}}_{\text{ezt nem mindig vettük figyelembe}} \end{aligned}\right\} \underline{\mathcal{H}_{el-ion}} \rightarrow$$

a teljes rsz. Hamiltonjával kéne a problémát leírni!

$\{r_i\}$ = ~~elektronok~~ koordinátái

$\{R_\ell\}$ = magok —||—

$$\mathcal{H}(\{r_i\},\{R_\ell\}) \cdot \Psi(\{r_i\},\{R_\ell\}) = E\,\Psi(\{r_i\},\{R_\ell\})$$

<u>fizikai megfontolás:</u>

el. → v_F (Fermi-seb.) a karakt. mennyiség $\sim 10^6 \frac{m}{s}$

ion → c_s (hangsebesség) —||— $\sim 10^3 m/s$

⇒ 3 nagyságrend kül. van a kettő között!

⇓

az elektronok sokkal gyorsabban reagálnak a ~~hatásokra~~

⇓

az e^--ok egy adott pill. lan (kis időintervallumban) látják magokat ~~kezeknek~~, és fordítva, az ionok egy <u>egyensúlyi</u> (átlagos) e^- rendszert ~~kezeknek~~ magásuk során!!!

elektronikus Hám.

$$\Phi(\{r_i\},\{R_\ell\}) \qquad (\mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{el-ion})\,\Phi(\{r_i\},\{R_\ell\}) = E_{el}^{(n)}(\{R_\ell\})\,\Phi_n(\{r_i\},\{R_\ell\})$$

teljes hfv.: $\Psi(\{r_i\},\{R_\ell\}) = \sum_n \underbrace{\Phi(\{R_\ell\})}_{\text{ion hfv.}} \underbrace{\varphi_n(\{r_i\},\{R_\ell\})}_{\text{elektron hfv.}}$

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{el-ion} + \mathcal{H}_{ion}$$

$$\mathcal{H}_{ion} = -\sum_\ell \frac{\hbar^2}{2M_\ell}\cdot\frac{\partial^2}{\partial R_\ell^2} + \frac{1}{2}\sum_{\ell,\ell'} U_{ion-ion}(R_\ell - R_{\ell'})$$

$$\Rightarrow \left[-\sum_\ell \frac{\hbar^2}{2M_\ell}\cdot\frac{\partial^2}{\partial R_\ell^2} + \frac{1}{2}\sum_{\ell,\ell'} U(R_\ell - R_{\ell'}) + E_{el}(\{R_\ell\})\right]\Phi_n(\{R_\ell\}) - \cancel{(\ldots)} =$$

$$= E\,\Phi(\{R_\ell\})$$

ahol $(\ldots) \sim \Delta_{ion}$ hatása $\Phi\{R_\ell\}$-re:

ennek a nagyságrendje $\sim \frac{m}{M_\ell}$ $\nearrow$ elhanyagolhatjuk (<u>adiabatikus közelítés</u>)

$\Rightarrow$ ha $\Psi = \sum_n \Phi\cdot\varphi_n$ helyett $\Psi(\{r_i\},\{R_\ell\}) = \Phi(\{R_\ell\})\,\varphi_n(\{r_i\},\{R_\ell\})$

adiabatikus szétválás

DE ez nem azt jelenti, hogy teljesen ~~független~~ a kétféle vsz.

$\varphi_n(\{r_i\},\{R_\ell\})$
$\varphi_n^{(0)}(\{r_i\},\{R_\ell^0\})$

$\rightarrow$ pl. az e^- ~~ok~~ hullámfv.-ei az ionok helyzetének gyökeszte vannak alapállapot-ban, $\Rightarrow$ van eltérés az eddigi számolásokhoz képest

2) ~~[illegible]~~ A probléma megoldása

a) $\mathcal{H}_{el-ion} \overset{\text{feltevés}}{=} \sum_i U_{el-ion}(r_i, \{R_\ell\})$ ← az ionok most nem az egyensúlyi helyükön vannak

$$R_\ell = R_\ell^{(0)} + \underbrace{u(R_\ell^{(0)})}_{\text{ionok kitérése (l. fononrészek)}}$$

$$= \underbrace{\sum_i U_{el-ion}(r_i, \{R_\ell^0\})}_{\text{eddig ezzel foglalkoztunk}} + \underbrace{\sum_i \sum_\ell \frac{\partial U_{el-ion}(r_i, \{R_\ell\})}{\partial u\{R_\ell\}} \cdot u(R_\ell^0)}_{(*)}$$

(*): ionok elmozdulásával arányos ~~potenciáltag~~ !

$\frac{\partial U_{el-ion}\text{ tag}}{\partial u}$:

$$u(R_\ell^{(0)}) = \sum_{q,\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_\ell N \omega_\lambda(q)}} \left[e^{(\lambda)}(q) \cdot a_\lambda(q) e^{iqR_\ell^0} + h.c. \right]$$

(hermitikus konj.)

↓ arányos a ~~[illegible]~~ ~~[illegible]~~ eltűntető operátorokkal

a (*) tag $\boxed{\sum_i f(r_i)}$ alakú, ahol $f(r_i)$ egyrész. operátor, vagyis

1 el.-ra hat

(most $f \sim \sum_{q,\lambda} \left[a_\lambda(q) \cdot (\dots) + a_\lambda^+(q) (\dots) \right]$)

$$\psi(r) \ni c^+_{nk\sigma} \Rightarrow \sum_{\substack{nk\sigma \\ n'k'\sigma'}} \left[\int dr\, \psi^*_{n'k'\sigma'}(r) f(r) \psi_{nk\sigma}(r) \right] c^+_{n'k'\sigma'} c_{nk\sigma}$$

$c_{nk\sigma}$

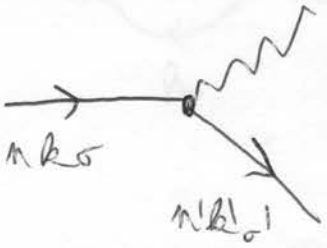
Vagyis:

- a Bloch-elektront az $(nk\sigma)$ áll.ból $(n'k'\sigma')$ állapotba írni az operátor (de csak 1 elektront)

• ekálen u változtatja a fononállapotot !

• a folyamat erőssége az $\psi^* \mathcal{H} \psi$ mátrixelem mondja meg, ahol ψ Bloch-állapot

⇒ Szemléltetés:



rácsvektor

$$k = k' + q + G$$

$n = n', \sigma = \sigma'$

$$k + q = k' + G$$

⇓ ii) kh. erőssége $\sim u \sim \{e^{(\lambda)}(q)\, a_\lambda(q) + h.c.\}$

$$\boxed{(*) = \mathcal{H}_{el-ph}} \Rightarrow \sum_{q,\lambda} \underbrace{\left(e^{\lambda}(q)\cdot q\right)} \cdot c^{+}_{k+q,\sigma}\, c_{k,\sigma} \left(a^{(\lambda)}_{q} + a^{+}_{\lambda,q}\right)$$

$$\lambda \Rightarrow \begin{cases} l \text{ (long)} \to \underline{e}^{\lambda} \parallel \underline{q} \\ t \text{ (transz)} \quad \underline{e}^{\lambda} \perp \underline{q} \end{cases} \qquad \left(u(k_l) = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_\lambda(q)}} \right)$$

⇒ nagy járulék „longitudinális" irányra lesz

(valójában csak szimm. irányokra van értelme erről beszélni)

long. → akusztikus $\sim \left(e^{\lambda}(q)\cdot \vec{q}\right) \sim q \xrightarrow{\omega(q) \to q} \frac{q}{\sqrt{q}} = \sqrt{q}$ de az ar. tény miatt

→ optikai $\sim \frac{1}{q}$ (polarizáció kettős miatt)

• $\psi_{n,k,\sigma}(r) \Rightarrow \varepsilon_{nk\sigma}$ -val jellemezhetjük az e^- állapotokat

DE most lesz egy <u>véges τ_e élettartama</u> a betöltött állapotok a szórás miatt

b) <u>Folyamatok</u>:

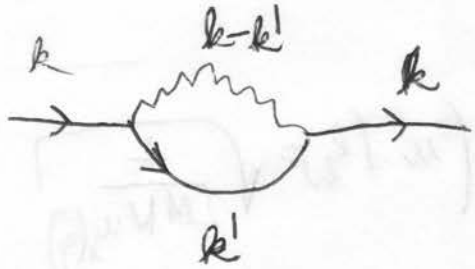
•

$ph \to e + h$ (lyuk) $\to \tau_{ph}$

$e + h \to ph$

$\Rightarrow$ a fononoknak is véges az élettartama, egyrészt a ph-ph, másrészt az e^--lyuk pár keltése miatt

• e^- terjedés:

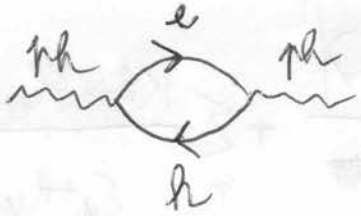


$\Rightarrow$ az e^- nem tud szabadon terjedni a ka. miatt, lassabban mozog $\Rightarrow$ (m) $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, $\varepsilon \to \varepsilon^*$

$m \to m^*$

$\Rightarrow$ nemcsak a mag- e^- potenciáltól, hanem a szórási folyamatokból is származó effektív tömeg

•

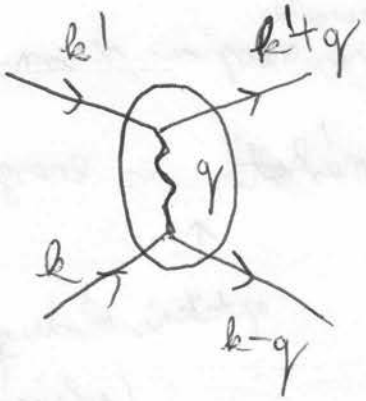


$\hbar\omega_\lambda(q) \Rightarrow \hbar\omega_\lambda^*(q)$ $(\varepsilon \to \varepsilon^*)$

fonon nem szabadon terjed,

renormálódik az energiája

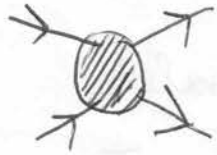
•



szórási folyamat fononon keresztül

$\Rightarrow$ $e^- - e^-$ közötti <u>effektív kh.</u>

$\downarrow$ ez ad egy vonzó járulékot



ez a kh. adja a szupravezetést

(Cooper-párok)!

c) <u>Pert. számítás</u>

$k \Rightarrow k', 1_q$ (1 fonon állapot)

$k, 1_q \Rightarrow k' = k + q$

$$\boxed{\mathcal{H}_{el-ph} = \sum_{q,k} D_q c^+_{k+q} c_k \left(a_q + a_q^+\right)}$$

akusz. $\sim \sqrt{q}$

opt. $\sim \frac{1}{q}$

ezt a tagot a $\hat{H}$-ban perturbációként

kezelhetjük

$k, \psi_k \Rightarrow |k\rangle, \varepsilon_k$

$$|k\rangle^{(1)} = |k\rangle + \sum_q |k-q, 1_q\rangle \frac{\langle k-q, 1_q | \mathcal{H}_{el-ph} | k\rangle}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q}$$

$\cancel{\varepsilon_k^{(1)} = \varepsilon_k +}$

$$\varepsilon_k^{(1)} = \varepsilon_k + \sum_q \frac{|\langle k-q|1_q|\mathcal{H}_{el,ph}|k\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q} + \sum_q \frac{|\langle k+q|\mathcal{H}_{el-ph}|k,1_q\rangle|^2}{\varepsilon_k + \hbar\omega_q - \varepsilon_{k+q}}$$

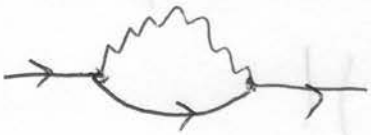
Mekkora járulékot okoz ez egy kristályban? ($\leftarrow \varepsilon_k, \mathcal{H}_{el-ph}$)

- fémekre: nem ad nagy járulékot (lényegében nincs energia renormalizáció)
- alkáli ~~halogenidek~~ atomok: a korrekció összemérhető az energiával

↓

nem lehet perturbatíve kezelni!

↑ optikai módusokkal (polarizációkkal)



ez nagyon jelentős járulék

„feltöltődik" az e^-,

$\boxed{\text{polaron}}$

magával visz egy fonon rudat, folyton kibocsájt-elnyel egy fononf

→ m^* nagy lett

■ sokféle problémáról:

$$\sum_q \frac{|\langle k-q|1_q|\mathcal{H}_{el-ph}|k\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q + i\delta} + \sum_q \frac{|\langle k+q|\mathcal{H}_{el-ph}|k,1_q\rangle|^2}{\varepsilon_k + \hbar\omega_q - \varepsilon_{k+q} + i\delta}$$

lehet imaginárius része az energiának (Green-fv.-ből)

→ $\frac{1}{r}$ adja meg az állapot élettartamát

→ $e^{i\varepsilon_k t/\hbar} = e^{i\tilde{\varepsilon}_k t/\hbar} e^{-rt/\hbar}$

$\varepsilon_k = \tilde{\varepsilon}_k + i\Gamma$

vagy (másik módszer):

$$W_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k | \mathcal{H}_{el-ph} | k-q, 1_q \rangle \right|^2 \delta(\quad) +$$

$$+ \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k, 1_q | \mathcal{H}_{el-ph} | k+q \rangle \right|^2 \delta(\quad)$$

$\downarrow$

$\tau_q = \ldots$ ugyanazt kapjuk, mint itt levezetésből

<u>Fononokra ugyanez elvégezhető (lyuk-pár keltés)</u>

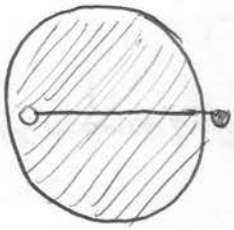
$$\hbar \tilde{\omega}_\lambda(q) = \hbar\omega_\lambda(q) + \sum_k \frac{\left| \langle 1_q | \mathcal{H}_{el-ph} | k_{el} (k \pm q)_{ly} \rangle \right|^2}{\hbar\omega_\lambda(q) - \left[\varepsilon_k - \varepsilon_{k \pm q} \right]}$$

(átadott en.)

itt kapok nagy járulékot, ahol $\Delta\varepsilon$ kicsi $\rightarrow$ Fermi-gömb felszínéhez közel

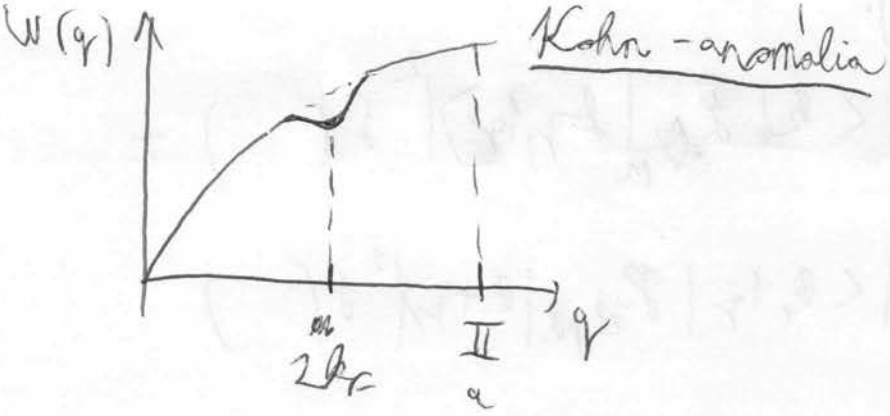
(a lyuk belül, e^- kívül keltődik)

lehetséges, hogy annak a legnagyobb az állapotsűrűsége, amikor a párok (e^-, lyuk) olyanok, hogy a Fermi gömb 2 ellentétes pontján keltünk e^--lyuk párt, azaz

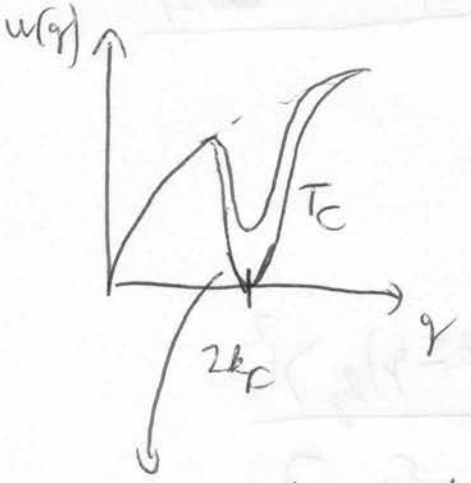


$\boxed{q \sim 2k_F}$ $\rightarrow$ ekkor nagy a járulék

energia korrekció:



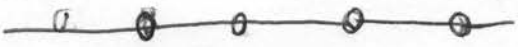
- 3D rsz.-ben ez nagyon kis járulék
- DE 1D és 2D-nél ez jelentős módosulás



$w(2k_F)=0$

T_c hőmérséklet elérésétől $w(q)$ a 0-t

ekkor Bose-kondenzáció jön létre!



$u=(a_q+a_q^+)$ $\langle a_q\rangle\neq 0$ sokrész. rszben

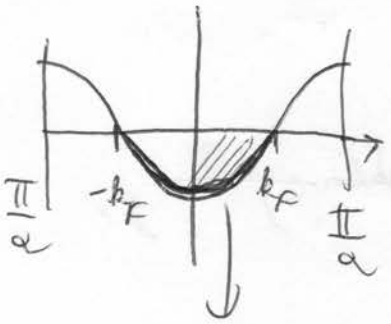
torzulás

statikus ~~deformáció~~ jelenik meg, $q=2k_F$ periódussal

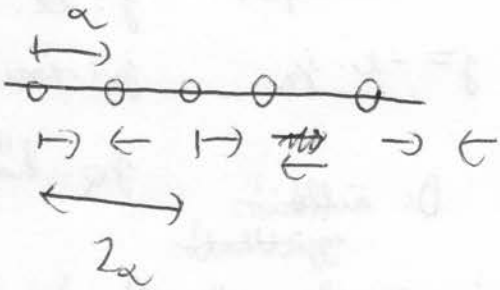
$\langle q\rangle_{q=2k_F}\neq 0$

sávszerk.-ben

$$2k_F = \frac{\pi}{a}$$



$G = \frac{2\pi}{a}$ $\quad G' = \frac{2\pi}{2a} = \frac{\pi}{a}$

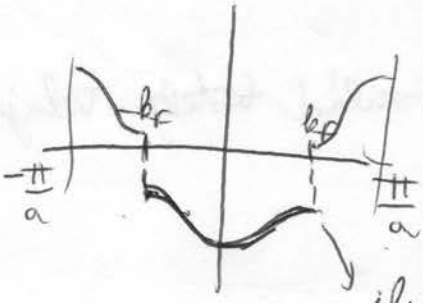


ezek vannak betöltve

egy duplázódás jön létre a rsz. ben → 2a periodicitás

⇓

a BZ feleződik



ilyenkor torzul az ionsz. beli sáv ⇒ ⊥ a BZ szélére

kedvezőbb-e ez az állapot (kisebb az energiája)

→ csak az ionsz.-t nézve igen ✓ (a torzulás miatt),

de az e^- rsz. energiáját is beleértve már összességében

nő az energia

. óra

Vezetési tulajdonságok

1) $E, B, \nabla T$ hatására áram indul meg (lineáris válasz)

σ: vezetőkép. j: el. áram

$\underline{j} = \underline{\underline{\sigma}}\,\underline{E}$ $\quad j = -e \cdot j_n$ $\quad j_n$: rész. áram

$\underline{j}_n = -\underline{\underline{D}}\,\nabla n$ $\quad D$: diffúziós együttható $\quad j_Q$: hőáram

$\underline{j}_Q = -\underline{\underline{\lambda}}\,\nabla T$ $\quad \lambda$: hővezető képesség

(Kubo-formula: ...)

$\sigma, D, \lambda \Rightarrow$ ebből lehet következtetni a szilárd testek tulajdonságira

(~~Fenomenologikus~~)

2) Onsager-~~(elmélet)~~ tétel:

j, j_n, j_u, j_Q, j_S $\quad E, \nabla T, \ldots$

j_u ↓ energia áram

ez a tag szil. testeken elhanyagolható

$$dU = TdS - \cancel{pdV} + \mu dN$$

$$j_u = \underbrace{T \cdot j_S}_{j_Q} + \mu \cdot j_n \qquad j_Q = j_u - \mu \cdot j_n$$

$$\int \frac{dn}{dt}\, dV = \int_F j_n\, dF \rightarrow \boxed{\frac{dn}{dt} + \operatorname{div} j_n = 0}$$

kontinuitási egyenlet

(rész. nem keletkezik a folyadékban)

ugyanígy:

$$\frac{du}{dt} + \operatorname{div} j_u = \underbrace{jE}_{\text{Joule-hő}}$$

← energia- és entrópia termelődés a dV térfogatban

$$\frac{ds}{dt} + \operatorname{div} j_s = \underbrace{\dot{s}}_{\text{entrópia termelés (produkció)}}$$

$$\dot{s} = \frac{1}{T}\left[\left(E + \frac{\nabla\mu}{e}\right) j - \frac{\nabla T}{T} j_Q\right]$$

$$\dot{s} = \frac{1}{T}\sum_i \vec{X}_i \cdot j_i \qquad \vec{X}_i : \text{a } j_i \text{ áram hajtóereje}$$

$$\Rightarrow \vec{X}_u = \vec{E} + \frac{\vec{\nabla}\mu}{e}, \quad \vec{X}_Q = -\frac{\vec{\nabla}T}{T}$$

ha az áram és hajtóerő között lin. a kapcsolat

$$\vec{j}_i = \sum L_{ij} \vec{X}_j$$

↓

lehetnek a külső áramok között keresztelektusok,

pl. termoelem: $\nabla T \Rightarrow j_E$,

Seebeck-eff.: $\vec{E} \Rightarrow j_Q$

$$\dot{s} = \frac{1}{T}\sum_{ij} L_{ij} \vec{X}_i \vec{X}_j$$

<u>Onsager-tétel</u>: ha $B=0$

$$\boxed{L_{ij}^{\alpha\beta} = L_{ji}^{\beta\alpha}}$$ (szimm. mátrix)

(i,j index → hajtóerő típusa

α,β index → vektorok komponense (tekintési irány))

• ha $B \neq 0$: $L_{ij}^{\alpha\beta}(B) = L_{ji}^{\beta\alpha}(-B)$

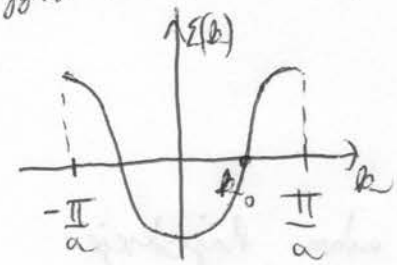
3) $E \Rightarrow \sigma = ?$

kárisztek:

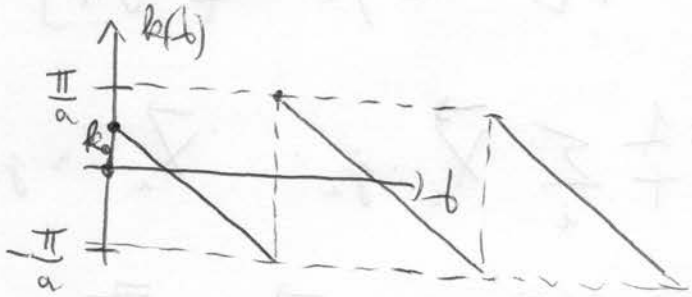
a) $k(r, k)$ $\quad \frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} = v_k \quad \hbar\dot{k} = -e(E + v \times B)$

legyen a disp. reláció:

$$k(t) = k(0) - \frac{e}{\hbar} E t$$

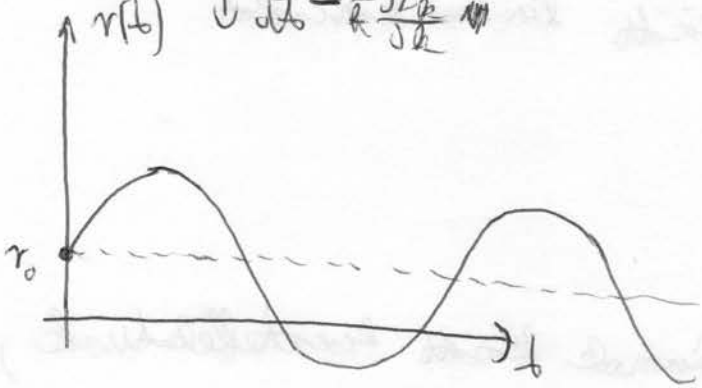


$\xrightarrow{E}$



k-térben a hullámszám egyenletesen változik

$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k}$



Bloch-oszcilláció

konstans $\vec{E}$-re az e^- oszcillál

Egyenáramról változnak?

↳ Nem vettük figyelembe az ütközéseket!

$\Rightarrow \tau$ ütközési idővel kell leírni az ütközést

~~$f(k, r, t)$~~

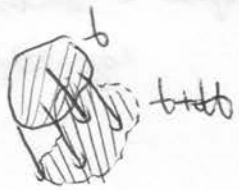
kiindulás: $f(r,k,t)$

$dk\,dr$

(r,k,t)

$$dN = \underbrace{f(r,k,t)}\,\frac{dk\,dr}{(2\pi)^3}$$

pont körül



t

$t+dt$

$t+dt$ időben:

$$r(t+dt) = r(t) + \frac{\partial r}{\partial t}\cdot dt = r(t) + v_k\,dt \quad , \quad v_k = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_k}{\partial k}$$

$$k(t+dt) = k(t) + \frac{\partial k}{\partial t}\,dt = k(t) - \frac{e}{\hbar}\left(E + v\times B\right)dt$$

– ha a részecskeszám megmarad:

$$dN = f\left(r(t+dt), k(t+dt), t+dt\right)\cdot\frac{dk'\,dr'}{(2\pi)^3} = f\left(r(t), k(t), t\right)\frac{dk\,dr}{(2\pi)^3}$$

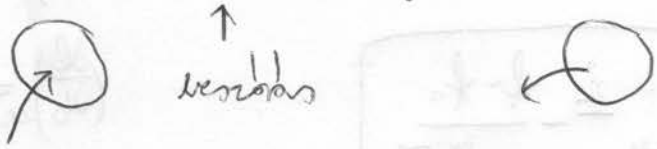
• ~~(Liouville)~~ Liouville-~~tétel~~: $dk\,dr = dk'\cdot dr'$

$$\Rightarrow f\left(r(t+dt), k(t+dt), t+dt\right) = f\left(r(t), k(t), t\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r}\cdot\underbrace{\dot r}_{v_k} + \frac{\partial f}{\partial k}\cdot\underbrace{\dot k}_{-\frac{e}{\hbar}(E+v\times B)} = 0$$

ha a rész. szám megmaradna

– DE ha van ütközés: növekedhet vagy csökkenhet a rész. szám!



szórás

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r}v_k + \frac{\partial f}{\partial k}\left(-\frac{e}{\hbar}\left(E + v\times B\right)\right) = \left(\ \right)_{ütk} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out}}$$

Boltzmann-egyenlet

$dr\,dk$

(r,k)

$$k \Rightarrow k' \qquad \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out}\cdot dt = \sum_{k'} \overbrace{W_{kk'}}^{\text{átmenti valószínűség}}\ \underbrace{f(r,k)\left[1 - f(r,k')\right]}_{\text{annak a valsz.-e, hogy jelen van a rész.}}dt$$

a végállapot üres-ek egyszer

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} dt = \sum W_{k'k}\, f(k') \cdot \left[1 - f(k)\right] dt$$

ide beírjuk a Boltzmann egyenletet

$\Rightarrow$ integrodiff. egyenletrsz., nemlineáris.

(átl. ban nem tudjuk megoldani)

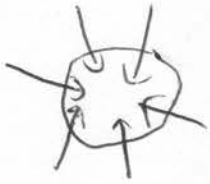
b) <u>Közelítés:</u>

τ, $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in}$, $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out}$

→ kiszórás:

$$f(r,k,t)\,\frac{dr\,dk}{(2\pi)^3}\,\frac{dt}{\tau} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out}$$

arra $\forall$ rsz. szóródjon $\frac{1}{\tau}$ rsz.-el



→ beszórás:

~~(integrálni kell)~~

- $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out}$ termikus egyensúlyban annyi rsz. szóródik be, mint amennyi ki

$f = f_0$: egyensúlyi eloszlás

- nincs memóriája a rsz.nek $\Rightarrow$ mindegy milyen állapotból ~~szóródik~~ jön a rsz.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in}\left(f = f_0\right) = f_0(r,k,t)\,\frac{dr\,dk}{(2\pi)^3}\,\frac{dt}{\tau}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out} =$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk} = -\frac{f - f_0}{\tau}}$$

a szóródás attól függ, mennyire térünk el az egyensúlytól

(ha nagyon, akkor nagy a szóródás)

stacionárius eset

k-tól függhet

$$\Rightarrow \boxed{\cancel{\frac{\partial f}{\partial t}} + \frac{\partial f}{\partial r} v_k + \frac{\partial f}{\partial k}\left(-\frac{e}{\hbar}\left[E + v \times B\right]\right) = -\frac{f(\;) - f_0(\;)}{\tau_k}}$$

relaxációs idő közelítés

baj: τ_k-t most nem ismerem $\Rightarrow$ nagalmas szórásra akarom kiszámolni a fenti formulákból $\boxed{\varepsilon_k = \varepsilon_{k'}}$

c) $\tau_k = ?$

$f = f_0 + f_1$ ← egyensúlytól való kitérés

$$f_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$$ termikus egyensúly

$T(r)$: a rsz. ben ~~van~~ lokális (helyen vált.) hőm. van

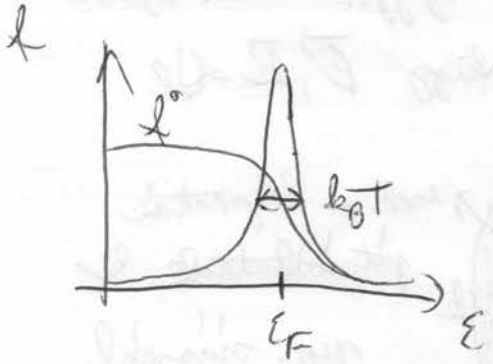
$\Downarrow$

$\mu(r)$

$$f_0(r,k) = \frac{1}{e^{[\varepsilon_k - \mu(r)]/k_B T(r)} + 1}$$ lokális egyensúlyi eloszlásfv.

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r}$$

$$\frac{\partial f}{\partial k} = \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right) \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial k}$$



$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$ a Fermi-energia körül különbözik lényegben 0-tól

$\Rightarrow$ a Fermi-felület közelében történik a szórás

(nincs ütk. ban kis energiás folyamatokról van szó

$\Rightarrow \varepsilon_F$ közelében maradunk) most $d\varepsilon = 0$

$$\Rightarrow f_1 = -k_B T \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right) \cdot \overset{\text{hajtóerő}}{X}$$

(l. 153-154. old.)

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out} dt = \sum_{k'} W_{kk'} f(r,k)\left[1 - f(r,k')\right] dt$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in} dt = \dots$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk} = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'} f_0(k)\left[1 - f_0(k')\right] \cdot \left\{\frac{f(k')(1-f(k))}{f_0(k')(1-f_0(k))} - \frac{f(k)\cdot\left[1-f(k')\right]}{f_0(k)\left[1-f_0(k')\right]}\right\}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk} = -\left[f(k) - f_0(k)\right] \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'}\left[1 - \frac{X(k')}{X(k)}\right] =$$

$$:= -\frac{f - f_0}{\tau}$$

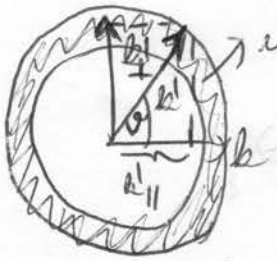
relaxáció idő köz. ben

$$\frac{1}{\tau} = \underbrace{\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'}}_{\text{ez lesz a szór. élettartama}} \cdot \left[1 - \frac{X(k')}{X(k)}\right]$$

Miért kaptuk korrekciót?

$X(k) = a(k)\,\vec{E}\cdot\vec{k}$ a hajtóerő leggyak. közelítésben lineárisan függ $\vec{E}, \vec{k}$-tól

$X(k') = a(k')\,\vec{E}\cdot\vec{k}'$



csak a folyamatok játszódhatnak le nag. szórásnál

nag. szórásnál $a(k) = a(k')$

$$\Rightarrow 1 - \frac{X(k')}{X(k)} = \left(1 - \frac{\vec{E}\cdot\vec{k}'}{\vec{E}\cdot\vec{k}}\right) = 1 - \cos\vartheta - \cancel{\frac{\vec{E}\cdot\vec{k}'_\perp}{\vec{E}\cdot\vec{k}}}$$

ez nem ad járulékot, mert kiátlagolódik az $\int d\varphi_k$-ban

$$k' = \cos\vartheta \cdot \vec{k} + k'_\perp$$

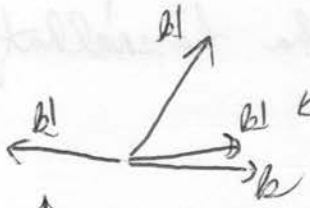
$$\Rightarrow \boxed{\frac{1}{\tau_{(tr)}} = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} W_{kk'} \left(1 - \cos\theta_{kk'}\right)}$$ $\Rightarrow$ megkaptuk τ $(=\tau_{tr})$-t!

ha $\underline{k} \parallel \underline{k'}$ ez nem ad járulékot

ha $\underline{k} \approx -\underline{k'}$, akkor nagy járulékot kapunk

$\Rightarrow$ Súlyozzuk az irányok a korrekcióval!

Miért? Mert az áram szempontjából lényeges, hogy milyen iránya szórodott a régi.



← kis járulék az áram (~~járulék~~) változásához

nagy járulék

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial r} \cdot v_k + \frac{\partial f}{\partial k}\left(-\frac{e}{\hbar}\left(E + v \times B\right)\right) = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

$$f = f_0 + f_1$$

$$\boxed{\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right) v_k \left[-e\left(E + \frac{\nabla\mu}{e}\right) - \frac{\varepsilon_k - \mu}{T}\nabla T\right] = -\frac{f - f_0}{\tau}} + \cancel{\ldots(f_1)}$$

f_1-től függő tagokat elhagyhatjuk, ha pl. homogén $\vec{E}$, és $\vec{\nabla} T = 0$ (nincs hőm. grad.)

d) Spec. eset: $\nabla\mu, \nabla T = 0$

$$\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right) v_k \cdot \left[-e\left(E + \cancel{\frac{\nabla\mu}{e}}\right) - \frac{\varepsilon_k - \mu}{T}\cancel{\nabla T}\right] = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

$$\boxed{f = f_0 + \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right)\tau \cdot v_k\left(-eE\right)}$$

$$j = -e \sum_k v_k f = -e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k \left[f(k) - f_0(k) \right]$$

$$\vec{j} = -e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{v}_k \left(\vec{v}_k \vec{E} \right) (-e) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k} \right) \tau$$

behelyett. a Boltzmann egy. mo.-t

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow v_k = \frac{\hbar k}{m^*}$$

$$j = \sigma E \Rightarrow \underline{\underline{\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m^*}}}$$

ez pont a Drude-modell eredménye

$\Rightarrow$ akkor igaz a Drude-modell, ha használhatjuk:

- a relaxáció idő közelítés
- nincs $\vec{B}$, $\vec{\nabla} T$, $\vec{\nabla} \mu$
- effektív tömeg közelítés alkalmazhatjuk a disp. relációra

Mi van, ha $\tau(T)$?

hőmérsékletfüggő

<u>.óra</u>

0) <u>Ism:</u>

a) $f(r, k, t)$

$f = f_0 + f_1$

egyensúlyi eloszlásfv.

$$f_0 = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu(r)/k_B T(r))} + 1}$$

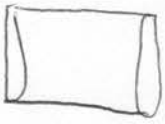
relax. idő közi

eloszlásfv. legyen térben homogén

$$-\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k} \right) v_k \cdot \left[-e \left(E + \frac{\nabla \mu}{e} \right) - \frac{\varepsilon_k - \mu}{T} \cdot \nabla T \right] = \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ütk}}_{-\frac{f - f_0}{\tau}} - v_k \cdot \cancel{\frac{\partial f}{\partial r}} + \frac{e}{\hbar} \cancel{\left(v_k \times \boxed{\vec{B} = 0} \right) \frac{\partial f_1}{\partial k}}$$

$$f = f_0 + \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right) \cdot \ldots \cdot \tau$$ Boltzmann egyenlet

t $\quad t+dt$

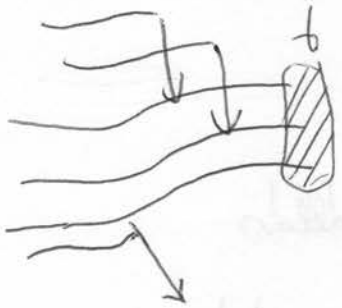


mely részecskék juthatnak el $t+dt$-be

(honnan tartanak a részecskék)

b) gyakorlaton Chambers-közelítés:

honnan jöttek a részecskék.



$\Downarrow$

$dt\, v_k\, dt$ a Boltzmann egyenletben B tér nélkül

$$f = f_0 + \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right) \tau \cdot w_k(t) \cdot \left(-e\left[E + \frac{\nabla\mu}{e}\right] - \frac{\varepsilon_k - \mu}{T}\nabla T\right)$$

$$w_k(t) = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-(t-t')/\tau} \cdot v_k(t')$$

$w_k(t) = v_k(t)$ ha $B=0$!

$\downarrow$

ugyanazt kapjuk

c) $j = \sigma E \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$ $\qquad$ σ: vezetőképesség

$j_Q = -\lambda \nabla T \rightarrow \lambda = \sigma T \cdot L$ $\leftarrow$ Lorenz-szám $\qquad$ λ: hővezetés

$\boxed{\lambda/\sigma = L \cdot T}$ Wiedemann-Franz-tv.

kvantumos számolás → 2-es faktor, kísérletben is ezt kapjuk

1) láttuk:

$$\frac{1}{\tau_k} = \sum_{k'} W_{kk'} (1-\cos\theta)$$ → a transzportban nem minden szórás ugyanolyan sz.-el játszik szerepet

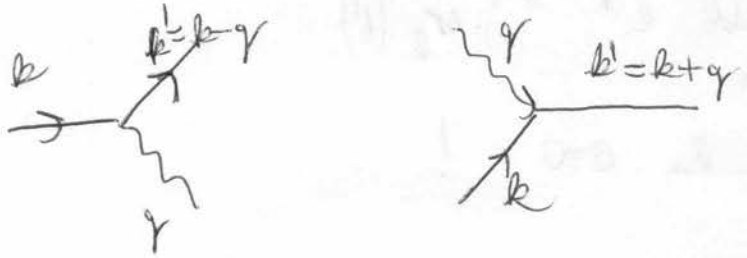
$$\frac{1}{\tau} \neq \cancel{X}$$

τ nem függ T-től

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = \text{konstans} = \text{maradék ellenállás}$$

ez akkor igaz, ha a minta hibahelyein szóródnak az e^--ok

a) de ha melegítjük a mintát, megjelennek más szórási mechanizmusok is, pl. e^--ph.-kh.!



↓

Mekkora ellenállást ad ez az eff.?

↳ $W_{k,k',q}$-t kell kiszámolni

átmeneti valszínűség (mátrixelem)

indukált emisszió miatt ilyen betöltési tény.

$$W^{(1)}_{k,k',q} = I_{kk',q} \underbrace{f(k)\cdot\left(1-f(k-q)\right)}_{-\text{lé}^{\text{e}^-\text{dés}}\text{. betöltések}} \cdot \left(1+g(q)\right)$$

~~hat~~ az indukált emisszió miatt minél több fonont van ~~keltek~~, annál nagyobb a folyamat lejátszódásának (fononkeltés) vsz.-e.

$$W^{(2)}_{kk'q} = I_{kk'q}\, f(q)\left[1-f(k+q)\right] g(q)$$

ha keltettünk már fonont, akkor g nem az egyensúlyi eloszlás.
→ itt is kel kell írnunk egy Boltzmann-egyenletet

$$\cancel{\frac{\partial g}{\partial t}} + \frac{\partial g}{\partial r} v_{pl} + \cancel{\frac{\partial g}{\partial k} \dot{k}_{pl}} = \left(\frac{\partial g}{\partial t}\right)_{itt}$$

stac. est

$\dot{k}_{pl}$ a phononokra ható erő (e^--nél $\vec{E}$ tér), de most ilyen nincs

emiatt a tag miatt elvileg csatolódna a fononokra és e^--ra felírt differenciálegyenlet (f, g-re)

$\boxed{\text{ehelyett } g\text{-nél } g_0\text{-al közelítünk}}$

$$\Rightarrow W^{(1)}_{k,k',q} = I_{kk'q} \cdot f(k)\cdot\left(1-f(k-q)\right)\left[1+g_0(q)\right]$$

$$^{(2)} = I_{kk'q} \cdot f(k)\left(1-f(k+q)\right)\cdot g_0(q)$$

τ hőm. függése g_0-on keresztül jelenik meg

b) magas hőm.-en: Debye-hőm.

$$k_B T = k_B \Theta_D \gg \hbar \omega(q)$$

$$g_0 = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega(q)}-1} \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega(q)} \gg 1$$

$\Rightarrow$ magas hőm.-en nagy a fononok száma

$$\Rightarrow [1+g_0] \simeq g_0 \sim T$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\tau} \sim k_B T$$

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m} \sim \frac{1}{T}$$

$$\boxed{\rho \sim T}$$

a fajlagos ellenállás $\sim T$, ami abból adódik, hogy egyre több fonon van magas hőm.-en

(klasszikusan: $\langle u^2 \rangle \sim T$ (kitérés²)

szórás $\sim \langle u^2 \rangle$)

$\Rightarrow$ el.-szennyezés $\rightarrow \rho \sim$ const

el.-ph. $\rho_{el-ph} \sim T$

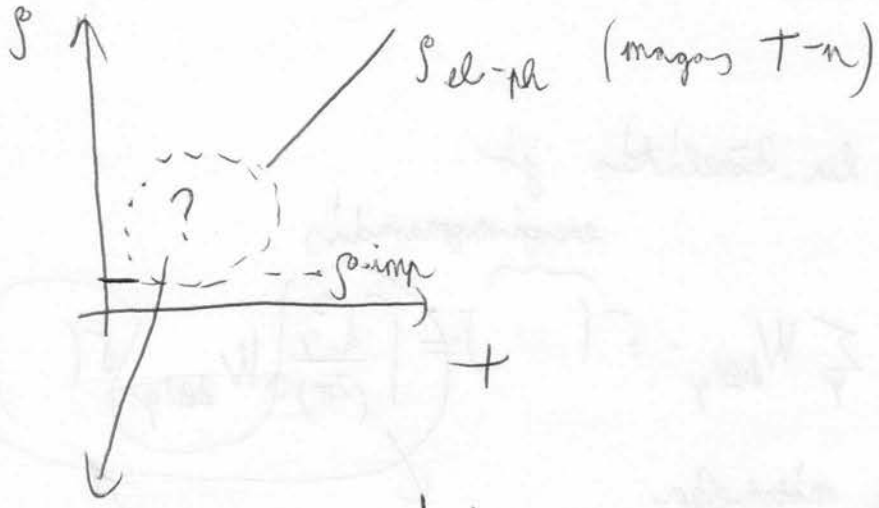
ha nincs a két folyamat közötti interferencia, akkor az

szórási
~~(ütközési)~~ vsz.-ek összeadódnak

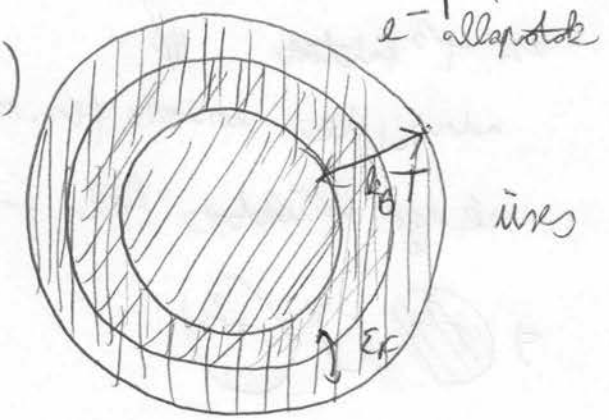
$\Rightarrow \frac{1}{\tau}$ -k összeadódnak

$$\Rightarrow \frac{1}{\tau_{imp}} + \frac{1}{\tau_{el-ph}} = \frac{1}{\tau}$$

$\rho \sim \rho_{imp} + \rho_{el-ph} + \ldots$ → az ellenállások összeadódnak



c)



///: betöltött áll.

szórásban
|||: lehetséges áll.-k

energiaátadás k_BT nagyságú lehet, mert

itt az összes állapot le van ~~tölt~~ve, k_BT-vel gerjesztve már betöltött állapotba lehet csak szórni!

$$\Rightarrow \boxed{k_BT \approx \hbar c_s q}$$, vis

fonon en. ja

c_s: hangsebb.

fononok

$$q_0 = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega(q)}-1} \Rightarrow \cancel{\hbar\omega(q) > k_B T} \leftarrow \text{ezeknek a betöltöttség kicsi}$$

$$\underbrace{\hbar\omega(q)}_{} < k_B T$$

$\Downarrow$

csak ilyen fononok vannak

csak az akusztikus fononokkal tudunk dolgozni

$\Downarrow$

$\omega(q) = c_s \cdot q$ lin. közelítés jó

- $q_{max} \sim \frac{k_B T}{\hbar c_s}$

$$\sum_q W_{kk'q} \cdot \delta(\overbrace{\quad}^{\text{energiamegmaradás}}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} W_{kk'q}\, \delta(\quad)$$

- l. korábban: szórási mátrixelem

$$\sqrt{q} \sim \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega(q)}}\,(q \cdot e_q)$$

$(\omega(q) \sim q)$

$\Downarrow$ átmen. val. $\sim$ mátrixelem^2

$$W_{kk'q} \sim |\sqrt{q}|^2 \sim q \rightarrow T \text{ faktor}$$

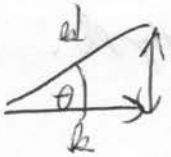
ez T^3 faktort adna, de emiatt (en. megm.) csak egy felületet kell $\int$-ni

$\Rightarrow$ $0 \sim T^2$

~~$(\Rightarrow T^2 \cdot T = T^3$ faktor$)$~~

- de van még egy szögfüggés is! $\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} = 1 - 2\sin^2\frac{\theta}{2}$

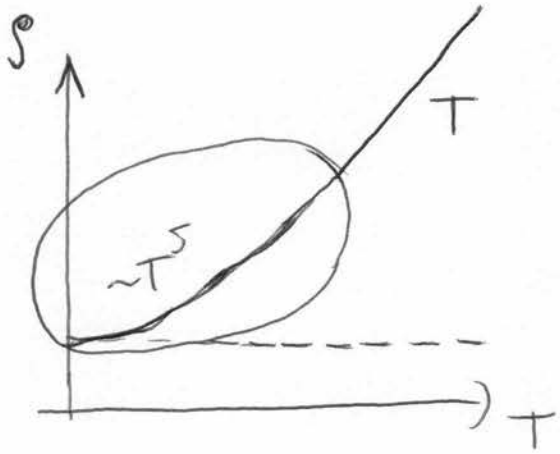
$1-\cos\theta$



$q_{max} = \frac{k_B T}{\hbar c_s}$

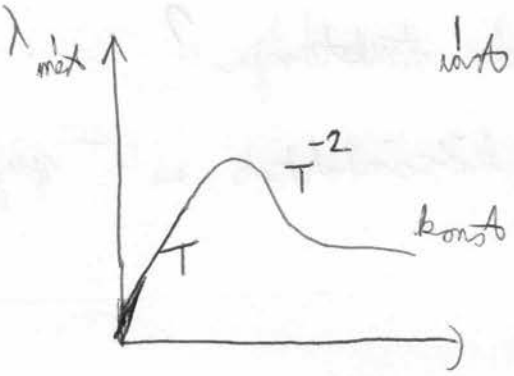
$$\underbrace{1-\cos\theta}_{\text{ha } \theta \text{ kicsi}} \sim (q_{max})^2 \Rightarrow T^2 \text{ faktor}$$

$\Rightarrow$ összességben: $\rho \sim \frac{1}{\tau} \sim T^2 \cdot T \cdot T^2 = T^5$



$$\rho \sim \begin{cases} \text{konst}, & \text{ha } T \to 0 \\ T^5, & \text{ha } T \approx T_{\text{sebye}} = \Theta_D \\ T, & \text{ha } T \text{ magas} \end{cases}$$

d) $\frac{\lambda}{\sigma} \sim T$ miatt $\Rightarrow$ $\lambda \sim \begin{cases} T, & \text{ha } T \text{ alacsony} \\ T^{-4} & \\ \text{konst.}, & \text{ha } T \text{ magas} \end{cases}$



$\Rightarrow$ $\rho \sim T^3$ a köztes tart.-a?

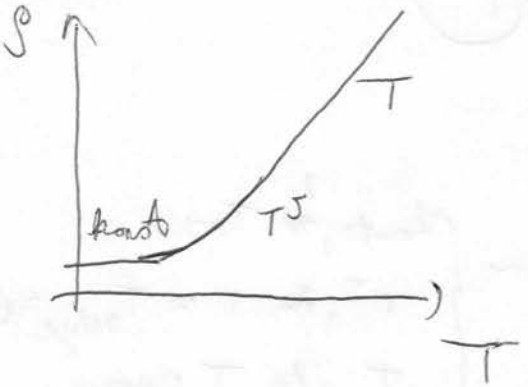
$\Downarrow$

ez akkor lehet, ha az $(1-\cos\theta)$ tagot nem vesszük figyelembe

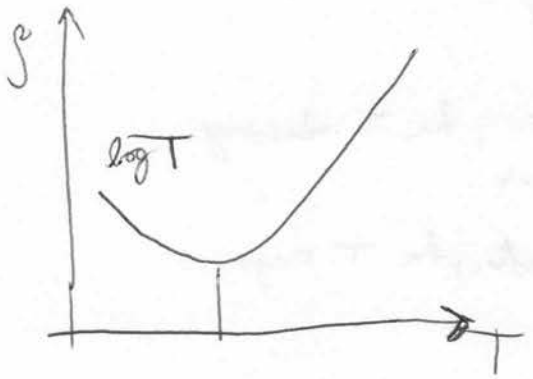
ez könnyű nincs jelen,

mert pl. az elsős szórás nem ad veszteséget vesztesen, de energia transportban a pl. itt is visz el energiát!

de ált. kis jó közelítés a $\rho \sim T^5$



e) Mérték olyan anyagot, melyek:

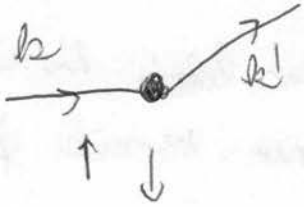


Mitől van ez a csökkenés alacsony hőm.-n?

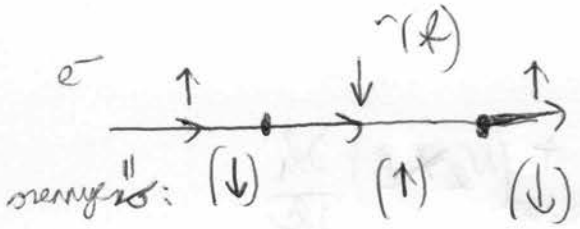
kilép való szórásnál

Mi van, ha a ~~kilépő~~ szennyezőnek van belső struktúrája?

pl. atom spinnel! → ~~(mágnes)~~ kölcsönhatottak az e^- spinjével



$W_{kk'}$ ↑↑ $W_{kk'}$ ↑↓ → ez elvileg különböző értéket adhat, de mérésből ⇒ nem ez az ok



csak legalacsonyabb

ha nem Born-közelítés~~ben~~ vesszük figyelembe

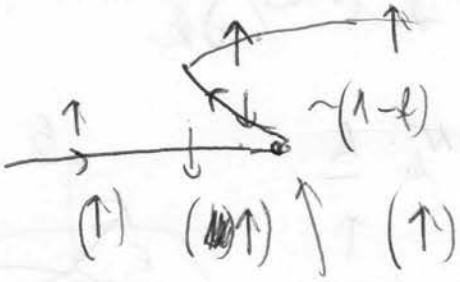
↓

lehet egy kötött állapot, melyen keresztül szóródik az e^--szennyező is.

magasabb rendűek tagjai, nem elég a $|\text{mátrixelem}|^2$

VAGY

(↓) a szennyező éri a Fermi-tengely, ↓↑ és kelt egy e^--lyuk párt



f: Fermi-fv.

a lyukat betölti az e^-

$$\sqrt{S(S+1) - M(M+1)}$$

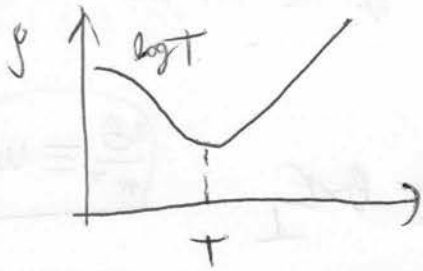
-1

$M \to M+1$

$M \to M-1$

⇓

ez tényleg ad egy log járulékot: <u>Kondo-effektus</u>



a lényeg, hogy egy belső szab. fok van, melyet alacsony hőm.-en energia befektetés nélkül tudunk változtatni

Transzport mágneses térben:

2) i.) $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right) v_k \left[\ \dots\ \right] = \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ütk}}_{-\frac{f-f_0}{\tau}} + (v_k \times B)\frac{\partial f_1}{\partial k}$

ii) ha $B \neq 0$

$$f = f_0 + \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_k}\right)\tau \cdot \underline{\underline{v_k}}(t)\left[\ \dots\ \right]$$

i) $\nabla T := 0$

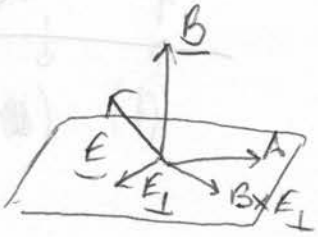
$E \neq 0$

$$-eE\, v_k \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right) = -\frac{f-f_0}{\tau} + \frac{e}{\hbar}(v \times B)\frac{\partial f_1}{\partial k}$$

Itt.: $f_1 = f - f_0 := -e\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k}\right)\tau \cdot v_k \cdot \underline{A}$

$\uparrow$ ismeretlen vektor

és $v_k = \frac{\hbar k}{m^*}$



$E \ni E_\parallel, E_\perp$

$A \ni A_\parallel, A_\perp$

$$j = -e\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k (f - f_0) = \underline{\underline{\sigma_0}} \cdot A$$

$A_\perp = a\, E_\perp + b \cdot (B \times E_\perp)$

mst.:

$$\frac{\partial f_1}{\partial k} = \frac{f_1}{k}\cdot\frac{\hbar}{m^*}$$

$$E \cdot v_k = v_k \cdot A - \frac{e\tau}{m^*}(v \times B)\, A \quad \to \text{egyszerű } A\text{-ra}$$

$$\Rightarrow E_\parallel = A_\parallel \qquad A_\perp = \frac{1}{1+\left(\frac{e\tau}{m^*}B\right)^2} E_\perp + \frac{\frac{e\tau}{m^*}}{1+(\ )^2} B \times E_\perp$$

$$\boxed{\frac{eB}{m^*} \equiv \omega_c}$$

$$j_\perp = \sigma_0 \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} E_\perp + \frac{\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} \underline{E}_{\perp\perp}$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} & \frac{-\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \frac{-\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} & \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \rho = \rho_0 \begin{pmatrix} 1 & +\omega_c\tau & 0 \\ -\omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

<u>Feltételek:</u>

- relax. idő kis
- gömbszerű Fermi felület (eff. tömeg kis)

<u>Ekkor</u> az ellenállás főtengelyében nincsen változás (nem lesz mágneses ellenállás), de xy és yx irányban változás igen!

$$\rho_{yx} = -\rho_0 \frac{eB}{m^*}\tau = \underbrace{\left(-\frac{1}{ne}\right)}_{\text{Hall-állandó}} B$$

$$\rho_0 = \frac{m^*}{ne^2\tau}$$

ii) $$u_k(t) = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-(t-t')/\tau}\, v_k(t')$$

gömbszerű Fermi-felületre körpályák mozognak, ezek ugyanazt

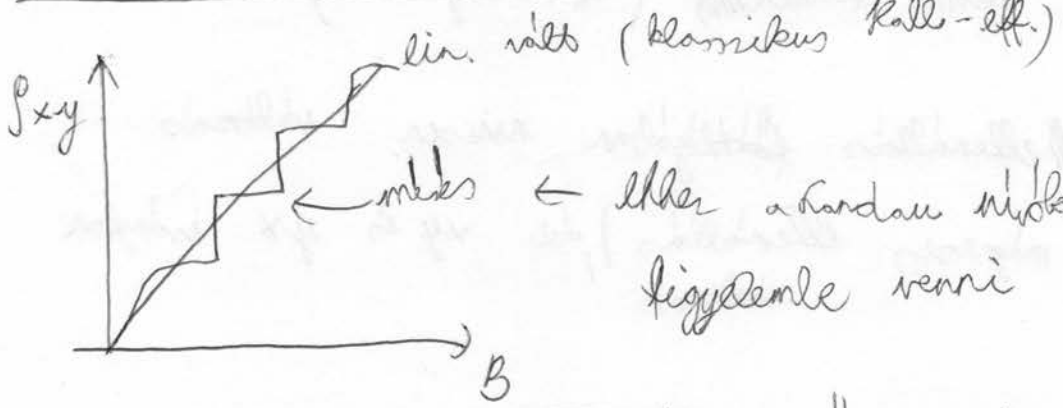
kapjuk, mint a másik egyenletbe kiírtuk

– altt. esetben, ha nem gömb-szerű a Fermi-felület

⇒ lehet mágneses ellenállás változás (diag. elemek is megváltoznak) ~~(ha zárt vagy~~ (nem zárt pályán mozog az e^-)

⇒ ~~meg~~ ki lehet mérni, hogy zárt vagy nyílt pályán mozognak az elektronok

Kvantumos Hall-effektus



← ehhez a Landau nívókat kell figyelembe venni

ha ρ nő, az összetartozó $\frac{B}{n}$ van olyan B, amikor ← vált. (pl. B nő) a Landau-szint telítődik

→ de a Landau-nívók majdnem folytonosan voltak

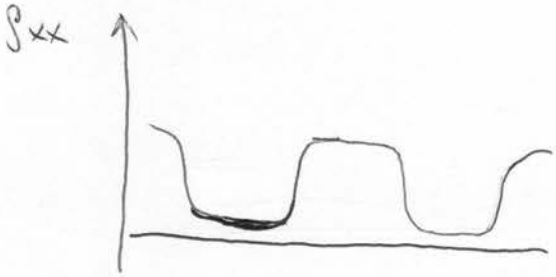
⇒ miért van ilyen nagy plató?

ha van szennyezés, láttuk, hogy kiszélesednek a Landau-nívók ↓

DE ezek a Landau-állapotok lokalizáltak, a vezetésre nem adnak járulékot !!!

↓

σ_{xx}, a diag. elemek 0-ra is válhatnak



11.29: Optikai tulajdonságok

Látható fény: $\lambda \sim 400 - 800$ nm

$E = \hbar\omega \sim 1.6 - 3$ eV

UV: $\lambda \sim 10 - 400$ nm

$\hbar\omega \sim 3 - 100$ eV

IR: $\lambda \sim 800$ nm $- 1$ μm

$\hbar\omega \sim 0.1$ meV $- 1.5$ eV

1, Klassz: Fény: klasszikus $\longrightarrow$ Maxwell-egy. $\rightarrow \varepsilon, \cancel{\mu}, \sigma(\omega)$

Szilárdest: fenomenologikusan

2, Fény: klassz

Szil: kvantumos leírás

3, F: kvant

Szil: kvant

1, E, D, B, H

$j_{ext} = 0$ (szabad áram)

hullegy: $$\frac{\partial^2 E}{\partial \underline{r}^2} = \varepsilon\mu \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{\varepsilon_r}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$$

$\mu \rightarrow \mu_0$

$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$

$\varepsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$

Síkhullám: $E = E_0 e^{-i\omega t} e^{iqr} \rightsquigarrow q = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_r$ $\quad N = \sqrt{\varepsilon_r}$ (törésmutató)

$q = \frac{\omega^2}{c^2} N^2$

ε_r ϕ feltétlen valós

$N = n + i\kappa$ ← abszorpciós index

↳ mellapítás szerint jelentkezik

törésmutató

refrakciós index

reflexiós tényező $R = \left|\frac{1-N}{1+N}\right|^{2?} = \frac{(n-1)^2+\kappa^2}{(n+1)^2+\kappa^2}$

ha van külső áram:

$j_{ext} = \sigma E$

Maxwell-egyből: $\nabla^2 E = \frac{\varepsilon_r(\infty)}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0 c^2}\frac{\partial E}{\partial t}$

elektronok ↗ kötött → ε_r

↳ szabad → j_{ext}

-et adja, így

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\left[\varepsilon_r(\omega) + i\frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega}\right]$$

Chambers-formulából

$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau}$ long vezetőképesség

opt ⇝ transzverz hullám

} ettő alt. ϕ n.a.

de ha $q \to 0$ ⇝ ϕ long és tr. ugyanaz lesz.

→ ni most $q \approx 0$-t vétünk

→ jó lesz

$\sigma_0 = \frac{n e^2 \tau}{m^*}$

leírva

$$\boxed{\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r(\infty) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}}$$

ahol $\omega_p^2 = \frac{4\pi n \tilde{e}^2}{m}$ (plazmon freksv.?)

$\tilde{e}^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ SI–CGS konverziós fakt.

$\varepsilon_r(\infty) \simeq 1$ ha csak szabad e^-

$N = n + i\kappa$, $N = \sqrt{\varepsilon}$

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$\omega < \omega_p$: $\varepsilon < 0$ → $\kappa \neq 0$ → visszaver → plazma él

$\omega > \omega_p$: $\varepsilon > 0$ $n \neq 0$ → átbocsátó

$\hbar\omega_p \sim 10\,eV$ fémekre

→ ∅ éles határ van

$1/\tau \ll \omega_p$ fémekre → 3 tartomány

ha $\omega < 1/\tau$ → erős abszorpció

$\omega \in (1/\tau, \omega_p)$ → relax

$\omega > \omega_p$ → reflex szinű

fémekre $\varepsilon_r(\infty) \sim 10$, karakterisztikát másik adja

Ami volt szjön ebből:

$$\boxed{m\ddot{r} = -eE - \frac{m\dot{r}}{\tau} \qquad E = E_0 e^{i\omega t}}$$

Drude AC

$\rightsquigarrow \alpha$ polarizáció $\rightsquigarrow \varepsilon$

Csatolt e-ok $\rightsquigarrow$ sajátfrekivel rezgő + 1 lag:

$$\boxed{m\ddot{r} + m\omega_0^2 r = -eE - \frac{m\dot{r}}{\tau}}$$

$\hbar\omega_0 \rightsquigarrow E_i$

eredmény: $\varepsilon_r(\infty)$

$$\boxed{\varepsilon_r(\omega) \simeq 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}}$$

Több e, több freq:

$$\boxed{\varepsilon_r(\omega) = 1 + \sum_j \frac{\omega_p^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}} = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0^2 m}\frac{1}{V}\sum_j \frac{N_j^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - \frac{i\omega}{\tau}}$$

2, Stílkent kvantumosan: $\phi_0, E_0 \Rightarrow \phi_j^{(1)}, E_j$ sajátfelek:

$$E = E_0 \frac{1}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) e^{-\delta(t)}$$

$t = -\infty$

polarizáció

$\times$ irányban ki?ztúz

$$\mathcal{H}_{int} = -\underline{E}\,\underline{P} = e\underline{E}\,\underline{r}$$

$$\underline{P} = -e\underline{r}$$

időfüggő perturbációszámmal. gerjesztés

$$\psi(r,t) = \overset{C_0(t)}{\phi_0(r)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \sum_j c_j(t)\, \phi_j(r)\, e^{-iE_j t/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial c_j(t)}{\partial t} = \int \phi_j^*(r)\, \mathcal{H}_{int}\, \phi_0(r)\, e^{i(E_j - E_0)t/\hbar}\, dr$$ → elvégzendő

$$x_{j0} = \int \phi_j^*(r)\, \hat{x}\, \phi_0(r)\, dr$$ mtx elem

megoldva:

$$\boxed{c_j(t) = -\frac{1}{2}\frac{eE_x}{\hbar}\, x_{j0} \left\{ \frac{e^{i(\omega+\omega_{j0})t}}{\omega_{j0}+\omega-i\delta} + \frac{e^{-i(\omega+\omega_{j0})t}}{\omega_{j0}-\omega-i\delta} \right\}}$$

ahol: $\omega_{j0} = \frac{E_j - E_0}{\hbar}$

$$\boxed{\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{N}{V}\sum_j \frac{e^2|x_{j0}|^2}{\varepsilon_0 \hbar}\, \frac{2\omega_{j0}}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\Gamma_j\omega}}$$

hasonló, mint az osz., csak δ helyett

→ perturbációt 1. rendben számoltam → tőlük jön az élettartam

↳ Γ_j

sorban

ω_{j0} → e^--lyuk párok jelennek meg

3/ Ku-Ku

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i U(r_i) + \frac{1}{2}\sum_{ij} U(r_i, r_j)$$

$$p \to \hat{p} + eA \quad : \quad \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2m}(pA + Ap) + A^2$$

$\operatorname{div} A = 0$

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{e}{m} A p = \frac{\hbar e}{m_i} A \frac{\partial}{\partial r}$$

vektorpot kifejtése fononok szerint.

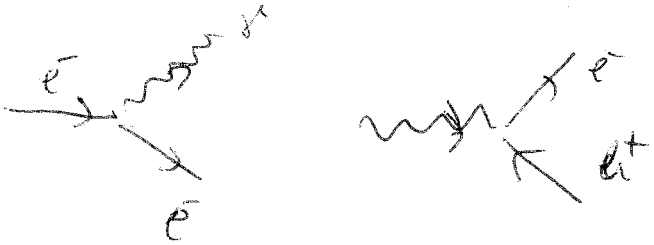
$$\boxed{\underline{A} = \sum_{\underline{q}} \underline{\vec{e}}(\cdot)\left[b_{\underline{q}}^{+} e^{i\underline{q}\underline{r}}(\cdot) + b_{\underline{q}} e^{-i\underline{q}\underline{r}}(\cdot)\right]}$$

polarizáció iránya

$$\boxed{\mathcal{H}_{int} \Rightarrow \sum_{\underline{k}\underline{q}} (\cdots)\, c_{\underline{k}}^{+} c_{\underline{k}+\underline{q}} \left((\cdot)\, b_{-\underline{q}} + b_{\underline{q}}^{+}\right)}$$

$\mathcal{H}$ e-ph-val analóg

$\bar{e}$ szám megmarad, fonon ϕ



⇝ elektron-fonon kh ✓

del kell még: fonon-foton kh

rácsrez: $\mathcal{H}_{rács} = \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i} + U_{harm} \Rightarrow \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i} + U_{harm} - \sum_i q_i \frac{1}{M_i} P_i A(r_i)$

q_i töltött $P_i \Rightarrow P_i - q_i A_i(r_i)$

(a, a^+) fonon ezt b, b^+ fotonban

$\cdots (a + a^+)(b + b^+)$

$\rightsquigarrow a_{\underline{q}}^{+} b_{\underline{q}} + a_{\underline{q}} b_{\underline{q}}^{+}$

fotonból fonon (1) fonon → foton (2)

(1) (2)

$E_{ph} = 10\,meV - 100\,meV$ ⇝ IR-vel mehet

ha ∅ más folyamat

ha a kettő egyenlő valószínű ⇝ oda-vissza alakul

⇝ kettő keverése lesz

bilineáris kifejezésekre vannak ⇝ Bogoljubov-trafó

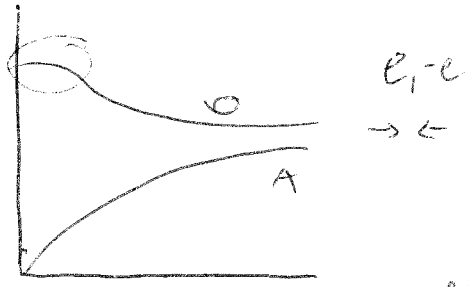
$\alpha^{*} = ua + vb$

⇓

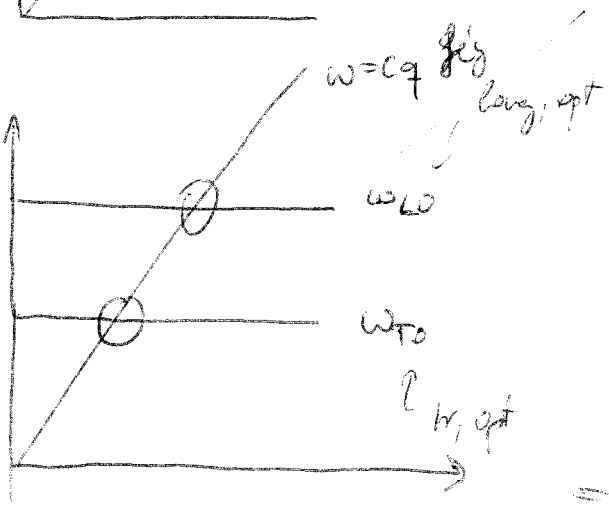
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_{foton} + \mathcal{H}_{foton-ph} = \boxed{\sum (\cdot)\, \alpha^{+}\alpha + (\cdot\cdot)\, \beta_{k}^{+}\beta_{k}}$$

$\hbar\omega_k^{(1)}$ $\hbar\omega_k^{(2)}$

$a^{+}a$ $b^{+}b$ $(a+a^{+})(b+b^{+})$



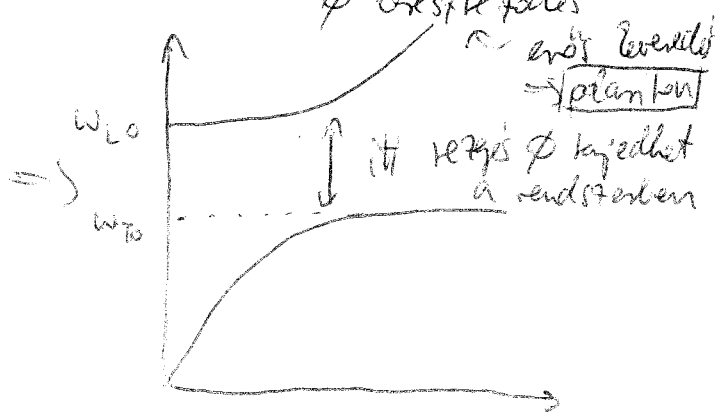
opt. rezgések érdekesek



milyen rezgések alakulnak ki

hibridizáció ⇝ keverés

⇝ ∅ kereszteződés



→ csak mágnes erő lépjen

fonon diszpersz módosító

⇓

van más folyt

→ fonon élettartama τ < visszakalakulás T-je

↳ csak megjel

$\mathcal{H}_{e-ph}$, $\mathcal{H}_{ph-ph}$ csatt

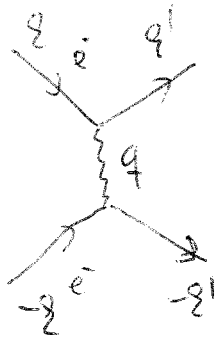
ionrisztekben eltűnt igaz

erős csk.

<u>12.02</u>: <u>Szupravezetés</u>:

Nyom csk, ami szabad $\bar{e}$ csoport ϕ érvényű

→ e-ph csk.



→ fonon szórás

mtx

$$T = H_{int} + \underbrace{H_{int} \frac{1}{\varepsilon - \mathcal{H}_0} H_{int}}_{c^+_{k+q} c_k (a_q + a^+_{-q}) \frac{1}{\quad} c^+_{k'+q'} c_{k'} (a_{q'} + a^+_{q'})} + \dots$$

fononrendszer eredeti állba marad végül,

de a 2 $\bar{e}$ átszóródik

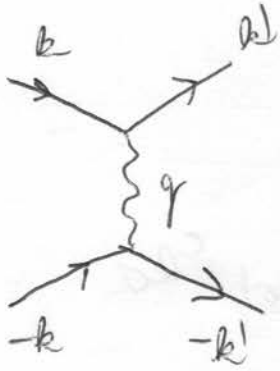
1. óra

Szupravezetés

1) Bevezetés:

Valamiféle kh. jelenik meg az elektronok között a ~-ben, ami sima vezetőben nincs → mi lehet ez?

sima vezetőben volt e^--ph. -kh.:



$$T = H_{int} + H_{int} \cdot \frac{1}{\varepsilon - \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_{int} + \dots$$

a kötés állapotban nem érvényes → emiatt lehet véges (nem 0) a nevező

$$c^+_{k+q} c_k (a_q + a^+_{-q}) \cdot$$

$$\underbrace{\varepsilon_k}_{e^- \text{ energia}}, \; \varepsilon < \underbrace{\hbar\omega_q}_{\text{tipikus fononen.}}$$

$$\cdot \frac{\quad}{(\quad)} \; c^+_{k'+q'} c_{k'} (a_{-q'} + a^+_{q'})$$

$$(\varepsilon_k - \mu) < \hbar\omega_q$$

a fononrendszer vissza marad eredeti áll.-ban, de az e^- elszóródott $k \to k'$-be

- $V_{kk'} \Rightarrow -V_0$ vonzó kh. jelenik meg! (mdha az e^--ok taszítják egymást)
- egyéb folyamatok (magnonok, ...) is okozhatnak vonzó kh.-t

~~elosztó~~

⇒ A vonzó kh. eredete ma is kérdéses, de az biztos, hogy a fononok okoznak ilyet, mis. az <u>izotóphatás</u> ezt jól magyarázza.

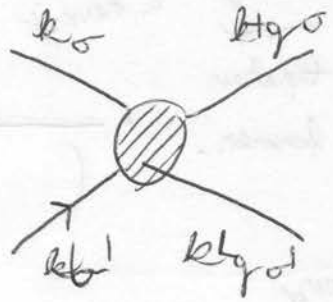
De a továbbiakban csak egy ilyt. vonzó kh.-al foglalkozunk

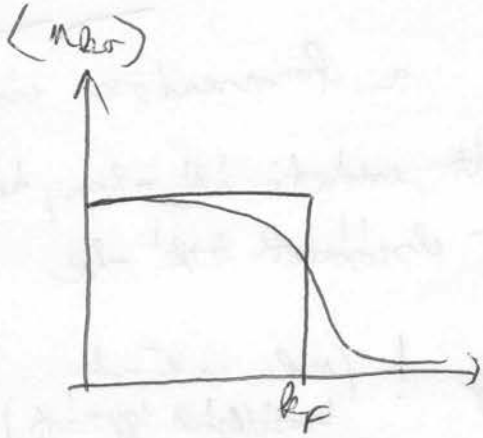
2) <u>Elméleti leírás</u>

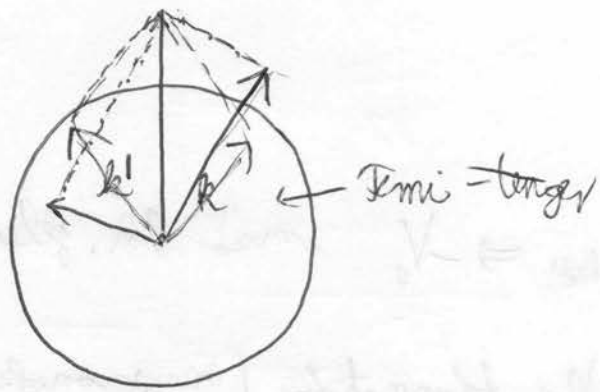
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{kin} + \mathcal{H}_{e-e\,kh}$$

$$\mathcal{H}_{kin} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 \Rightarrow \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

$$\mathcal{H}_{el-elkh} = \frac{1}{2V}\sum_{kk'q} U(\quad) c^+_{k+q\sigma} \cdot c^+_{k'-q\sigma'} \cdot c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}$$







Bet. szám

$$\langle n_{k\sigma}\rangle = \langle c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}\rangle$$

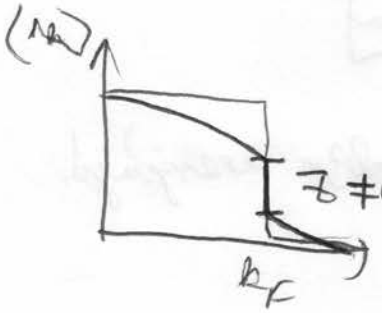
↳ véges T-n ez nem 1 vagy 0

olyan állapotokat veszek, ahol az összimp. megmarad

ha a pot. szám működik (akár az végtelen összegre is, de konvergens)

⇓ belátható

k_F-nél lesz egy éles Fermi-élem, és $\langle n_k \rangle \neq 0$



→ ilyenkor számít, hogy hol van k_F (itt nem)

ez igaz, ha a pot. szám konvergens

1D-ban pl. ~~mi~~ soha nem konvergens!

3D → ?

látni fogjuk, hogy az effektív e-e kh. vonzó lesz, és emiatt ~~(ilyen~~ instabilitások jelennek meg

→ ~~a~~ nem lesz konvergens

l-) $|FS\rangle$: Fermi-tenger

$$\underbrace{c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow}}_{\text{singlett állapot}} |FS\rangle$$ → ez ált. ban nem sajátállapot

(spin antiszimm., helyzett. szimm.)

$\boxed{\Omega: \text{kristálytérfogat}}$ (V a pot.)

$$|\Psi\rangle = \sum_k \alpha_k c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} |FS\rangle$$ → ez az ansatz más

$$\alpha_k = \frac{V_0}{2\varepsilon_k - \varepsilon} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{k'} \alpha_{k'}$$ (önkonzisztencia egyenlet) ← ekkor lehet az el-el kh. sajátállapotban

↳ önkonzisztencia feltétel:

$$1 = \frac{V_0}{\Omega} \sum_{k} \frac{1}{2\varepsilon_k - \varepsilon}$$

$\Downarrow$

$\varepsilon := 2\varepsilon_F - \Delta$ $\boxed{\varepsilon \text{ a pár energiája}}$

$\Delta = ?$ a fenti egyenletből a legalacsonyabb energiájú

lépésben

$$\Delta = \underbrace{2\hbar\omega_D}_{} \; \underbrace{e^{-4/(V_0 \rho(\varepsilon_F))}}_{} \Rightarrow \Delta \ll eV$$

tipikus ~~szerg~~ gyenge csatolás esetén ez hamar levág

fonon-en. $\approx 10 - 100$ meV $\ll eV$

$\Rightarrow$ kicsi, de véges csatolás

$\Downarrow$

$\varepsilon < 2\varepsilon_F \Rightarrow$ párok alakulnak ki $\Rightarrow$ az egész rsz.

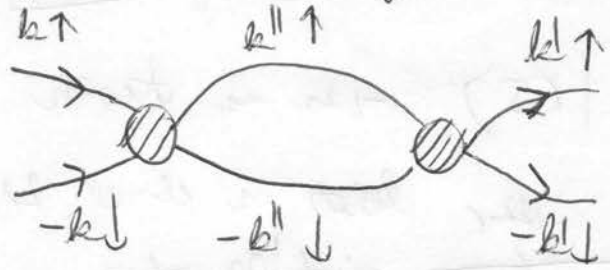
párokba rendeződik, így csökkenhet az energia

$\downarrow$ $\Downarrow$

<u>Cooper-párok</u> instabilitás a rsz.-ben

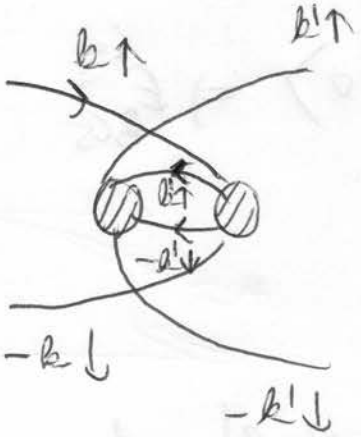
c) Magasabb rendekig

1.

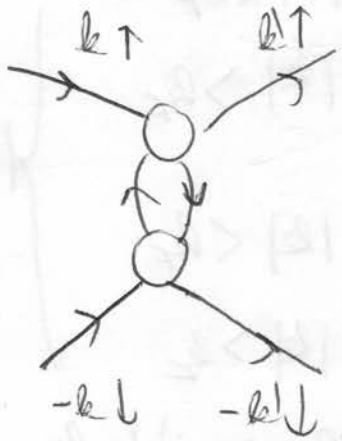


$\Downarrow$

olyan szórási folyamat, ahol Cooper-pár keletkezik a kötött állapotban

2. 

$\Rightarrow$ 2 e⁻-ból pár keletkezik, ezek helyét az eredeti pár betölti

3. 

az első két folyamat járuléka $\log T$-vel nő (a 3. elhanyagolható a 2. mellett)

- $T=0$-n divergálnak
- $T<T_c$-n a pert. számítás még működik
- $T>T_c$-n a pert.-s sor divergál

$$k_B T_c = \frac{e^{\gamma}}{\pi} 2\hbar\omega_D \underbrace{e^{-2/(V\cdot g)}}_{\text{ez a faktor lecsökkenti a hőmérsékletet 1-10 K-re}}$$

$\Downarrow$

T_c alatt a pesto-s sor elromlik, helyette az eloszlásban, Cooper-párok jelennek meg!

d) Írjuk le T_c alatt párokkal a sz.-t!

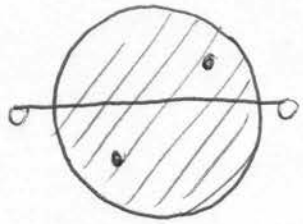
$$\Psi_{BCS} = \prod_k \left(u_k + v_k c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow}\right)|0\rangle \Rightarrow E^{(0)}_{BCS}$$

Bardeen-Cooper-Schiffer

u_k^2: nincs jelen a k imp. pár

v_k^2: jelen van a k imp.-ú pár

→ $T=0$-n (Fermi-gömb): speciálisan olyan eloszlás, hogy:



$$v_k = \begin{cases} 1 & \text{ha } |k| < k_F \\ 0 & \text{ha } |k| > k_F \end{cases}$$

$$u_k = \begin{cases} 0 & \text{ha } |k| < k_F \\ 1 & \text{ha } |k| > k_F \end{cases}$$

$\Big\} |\Psi_0\rangle \Rightarrow E_{FS}$

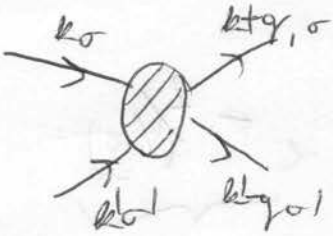
ha a pár egyik tagja a gömbben van, akkor a másik is

→ De van-e másik eloszlás, amire kisebb energiát kapunk az sz.-re, azaz $E^{(0)}_{BCS} < E_{FS}$?

• láttuk:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{kin} + \mathcal{H}_{e-e}$$

$$\frac{1}{2\Omega} \sum_{kk'q} U(kk'q)\, c^+_{k+q\sigma}\, c^+_{k'-q\sigma'}\, c_{k'\sigma'}\, c_{k\sigma}$$



most a legkisebb az σ folyamat, ahol $\boxed{k' = -k}$

$\boxed{\sigma = -\sigma'}$

$\Downarrow$

$$\sum_{kk'} V_{kk'} c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

↳ vagyis 0 összimp.-ú singlett állapot ~~singlett~~ 0 összimp. singlett párba szóródik

↳ $V_{kk'} \approx -V_0$ ált. kon jó az a közelítés, de a szupravezető típusától függően lehet, hogy nem írja le jól a sz.-t.

— ezzel milyen eloszlás jön ki?

a $\Psi_{BCS} = \prod_k \left(u_k + v_k c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow}\right)|0\rangle$ jól leírja a szt, még akkor is, ha a rész. szám változhat (nis ΔN pici)

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_k \xi_k \left(c^+_{k\uparrow} c_{k\uparrow} + c^+_{-k\downarrow} c_{-k\downarrow}\right) + \frac{1}{\Omega} \sum_{kk'} V_{kk'} \underbrace{c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow}}_{b^+_k} \underbrace{c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}}_{b_{k'}}$$

$$\xi_k = \varepsilon_k - \mu$$

$$E_{BCS} = \langle \Psi_{BCS} | \mathcal{H}_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle$$

$n_{k\uparrow} + n_{-k\downarrow}$ $\quad$ $b^+_k := c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow}$, $\quad b_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$ } Cooper-pár keltés / eltüntetés

• Ez olyan mintha 1 pár = 1 boson lenne?

Nem, mert:

$$\left(b_k, b_{k'}^+\right) = \delta_{kk'}\left[1 - n_{k\uparrow} - n_{-k\downarrow}\right]$$

• $$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_k \xi_k \left(1 - b_k b_k^+ + b_k^+ b_k\right) + \frac{1}{\Omega}\sum_{kk'} V_{kk'}\, b_k^+ b_{k'}$$

Sajnos nem tudjuk linearizálni, mert se nem bozonok, se nem fermionok

↓ 2. spinhullámok

$$\Psi_{BCS} = \prod_k \left(u_k + v_k b_k^+\right)|0\rangle$$

megj.: u_k és v_k áltl. lehet komplex is (fázis van)

$$\hookrightarrow E_{BCS} = \sum_k \xi_k \left(1 - \underbrace{\cancel{\langle b_k b_k^+\rangle}\, |u_k|^2}_{} + |v_k|^2\right) + \frac{1}{\Omega}\sum_{kk'} V_{kk'} v_k^* u_k u_{k'}^* v_{k'}$$

$-b_k b_k^+$ ↓ nem lehet jelen a pár, mert akkor nem tudunk oda betenni egy párt

$b_k^+ b_k$ ↓ kezdetben jelen kellett lennie

ennek a vsz-e $|u_k|^2$

nincs jelen a pár ↓ jelen van a pár ↓

$$\hookrightarrow |u_k|^2 + |v_k|^2 = 1 \quad \forall k$$

→ mellékfeltétel

$$\hookrightarrow E_{FS} = \sum_{|k|<k_F} \xi_k$$

↳ eltűnik $\cancel{|u_k|^2}$ (FS-nél nincs kh. $(V_{kk'} = 0)$)

E_{BCS} → kell minimalizálni $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ mellékfeltétellel!

↓

számolás ~~utáni~~:

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}}\right] \qquad |v_k|^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}}\right]$$

$$u_k^* v_k = \frac{\Delta_k}{2\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}} \qquad \Delta_k = \sum_{k'} V_{kk'}\, u_{k'}^*\, v_{k'}$$

↳ ha $\Delta = 0$ ⇒ szabad e^- sz-t kell visszakapni

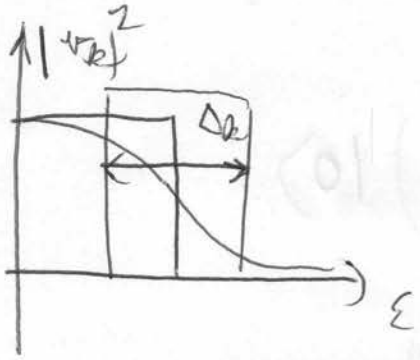
~~⇒ d)~~ ha ~~[illegible]~~ $\xi_k = -1$ ⇒ $|v_k|^2 = 1$

$|u_k|^2 = 0$

ha $\xi_k = 1$ ⇒ $|v_k|^2 = 0$

$|u_k|^2 = 1$ ✓

• de ha Δ véges



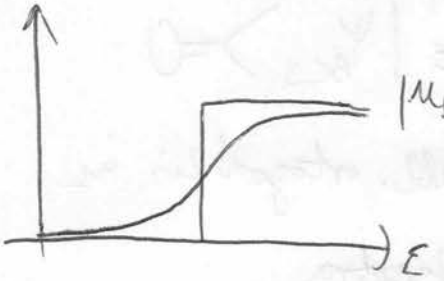
→ fellazult a Fermi-felület

⇓

↳ véges sz.-el párok jelennek meg

ε_F felett ⇒ ⊕ járulék a kin. energiára

↳ DE a párok be tudnak szóródni egymásba ~~[illegible]~~ mert a betöltés nem 1 mindenhol



⇓

− járulék a potenciális energiára

$\rightarrow \Delta_0 = 2\hbar\omega_D \cdot e^{-2/V_g}$ → ez az eloszlásparaméter minimalizálja az energiát

$$E_{BCS} - E_{FS} = -\Omega \cdot \frac{1}{4} \rho(\varepsilon_F) \Delta_0^2$$

mis:

$$\underbrace{\rho(\varepsilon_F)\, \Delta_0}_{\text{ennyi rész. tud párokba kötődni}} \cdot \Delta_0$$

a pár pto. energiája /2 az egyik rész.-re jutó en.

⇓

= létrejöhet az FS-nél kedvezőbb alapállapot!

e) gerjesztett állapotok

$$\Psi_{BCS} = \prod \left(u_k + v_k b_k^+\right) |0\rangle$$

i)

$k = k_1$ → kiválasztunk egy pto, amit gerjesztünk

$$\Psi_{exc}^{(1)} = \left(u_{k_1}^* \cdot b_{k_1}^+ - v_{k_1}\right) \prod_{k \neq k_1} \left(u_k + v_k b_k^+\right) |0\rangle$$

$|v_1|^2$ a rész.-e, hogy a gerjesztett pár jelen van (ilyenkor nincs jelen pár nincs jelen az alapáll.-ban)

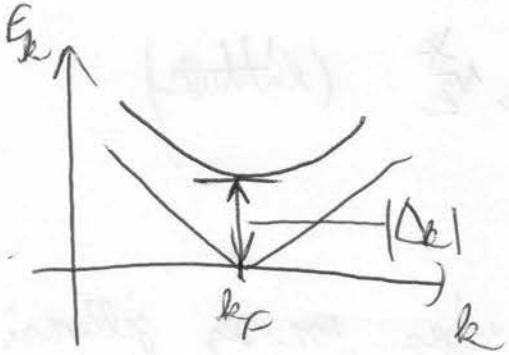
a rész.-e, hogy a k_1 gerj.

$$\langle \Psi_{exc}^{(1)} | \Psi_{BCS} \rangle = 0$$

a gerj. áll. ortogonális az alapállapotra

⇓

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$$



$\Downarrow$

amikor a fém a szupravezető állapotba kerül, nem tudunk tetsz. energiával gerjesztést kelteni!

ii) $$\Psi^{(2)}_{ext} = \underbrace{c^+_{k_1\uparrow}\, c^+_{k_2\downarrow}}_{\substack{2e^- \text{ nem} \\ \text{párban van,} \\ \text{hanem fotten imp.-al}}} \prod_{\substack{k \neq k_1 \\ k_2}} \left(u_k + v_k b^+_k\right) |0\rangle$$

$$E^{(2)}_{ext} = E_{k_1} + E_{k_2} > \underbrace{2\Delta_0}_{\substack{\text{a pár szétszakításához szükséges} \\ \text{min. energia}}}$$

f)

$$H_{int} = \frac{1}{\Omega} \sum_{kk'} V_{kk'}\, c^+_{k\downarrow}\, c^+_{-k\uparrow}\, c_{-k'\downarrow}\, c_{k'\uparrow}$$

$\cdot\ \langle c^+_{k\uparrow}\, c^+_{-k\downarrow} \rangle = 0$ normális állapotban

$\langle \Psi_{BCS} | c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} | \Psi_{BCS} \rangle \neq 0$ szupravezető áll.-ban

$\langle - \| - \rangle = u_k v_k^*$ (láttuk)

$\Downarrow$

$\langle c_{k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \neq 0$ ← ez a véges szv.-sűr. jellemzi a szv.-t! $\boxed{\text{rendparaméter}}$

vis $\Delta_k = \frac{1}{\Omega} \sum_{kk'} V_{kk'} u_{k'}^* v_{k'}$

$$\left(c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} - \langle c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} \rangle + \langle c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} \rangle \right) \cdot$$

$$\cdot \left(c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} - \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle + \langle \quad \rangle \right)$$

<u>átlagtérelmélet</u>: az átlagtól való eltérés kicsi, ezért

a $\left(c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} - \langle c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} \rangle \right) \left(c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} - \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \right)$

tagot elhagyom mert másodrendben kicsi !

$\Downarrow$ $\boxed{\text{Ehhez fontos, hogy ez } \neq 0 \text{ !!!}}$

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{1}{\Omega} \sum_{kk'} V_{kk'} \cdot \Big(c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle + c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \langle c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} \rangle -$$

$$- \langle c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow} \rangle \langle c_{k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \Big)$$

$\downarrow$

$b_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$

ezt már tudjuk linearizálni, mert c_k / c_k^+ fermion op.-ok!

$\Downarrow$ Bogol-jubov

$$\boxed{\mathcal{H}_{BCS}^{MF} = E_{BCS}^{(0)} + \sum_k E_k \left(\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k\right)}$$

mean-field

ahol

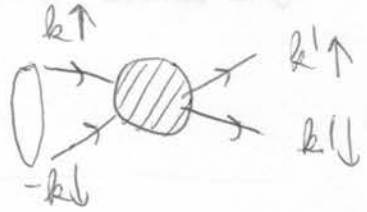
$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$$

mert kaptuk, mint a gerjesztett állapotokból

óra

Szupravezetők (folyt.)

0) ism.:



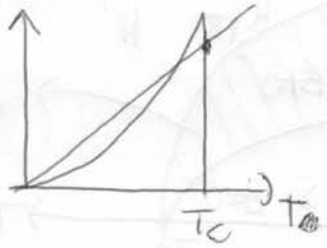
ha $T < T_c$

$$\langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle \neq 0$$

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}$$

$$\xi_k = \varepsilon_k - \mu$$

$C \sim T$ fémben, de szupra vezetőben exponenciálisan nő



supravezetőben a 0 ellenállás oka, hogy kis energiáknál (frekvenciáknál) a tér nem tudja a párokat szétszakítani ($\Delta \neq 0$ miatt)

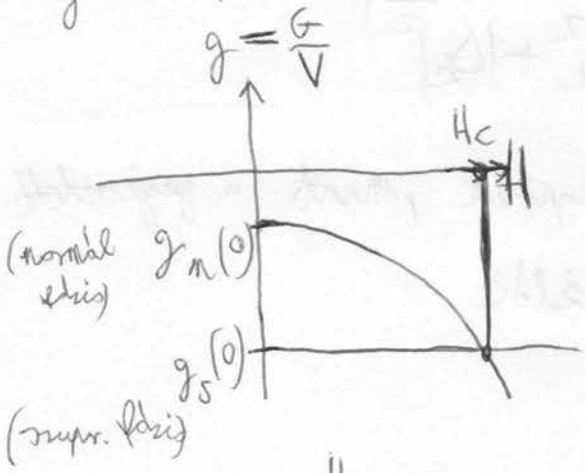
1) $B = 0$ $\quad H < H_c$

$B \neq 0$ $\quad H > H_c$, a sz. normál fázisba alakul át

Gibbs-féle szabadenerg.: $G = F - B \cdot H = E - T \cdot S - B \cdot H$

normál f.-ban:

$$\mu_r H \sim B = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T$$



$$G_T(H) = G_T(0) - \frac{1}{2}\mu_0 H^2$$

supr. f.-ban

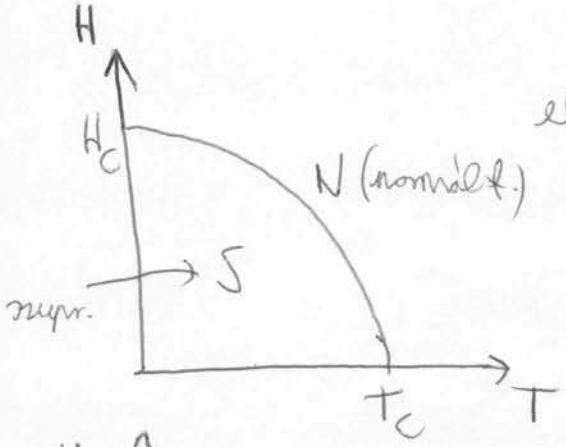
$$-\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T = B = 0$$

$G = \text{konst}$ (H-ban)

$\Downarrow$

$H < H_c$-nél a supr. fázis a kedvezőbb alacsonyabb

$\Downarrow$



elsőfajú supr.

csak ezekre igaz, hogy 1 homogén supr. fázis jelenik meg

másodfajú supr.

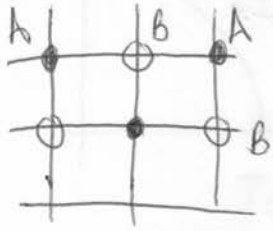
ebben a fázisban a Meissner-eff. nem jön létre ($B \neq 0$, hanem véges), de továbbra is vannak Cooper-párok

↓

mikroszkopikus elmélettel ezt nehéz leírni (de le lehet)

2) Ginzburg - Landau - elmélet

[kitérés: Landau-féle fázisátal. elmélet



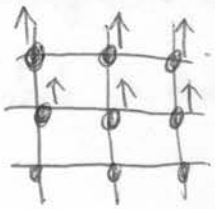
→ ötvözet

rendparaméter: $c_A - c_B$

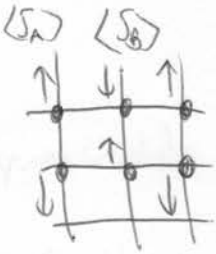
c_A, c_B → ha eltűnik a konc. különbség adott ráspontban, akkor rendezetlen az anyag,

ha van konc. kül., akkor rendezett

vagy



ferromágnes: rendpar. $\langle S_i \rangle \neq 0$



antiferromágnes

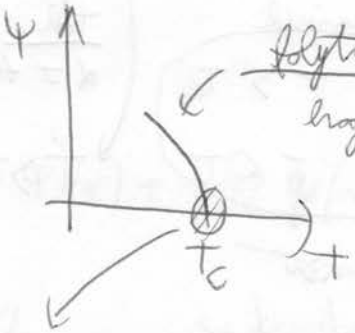
$\langle S_A + S_B \rangle = 0$

$\langle S_A - S_B \rangle \neq 0$ → rendpar.

⇒ rendparaméter (ψ):

$\psi \neq 0$ ha $T < T_c$

$\psi = 0$ ha $T > T_c$



folytonos a áttérés, de hogy T milyen fv.-e, az a sz.-t leíró egyenlet(ek)ből jön ki

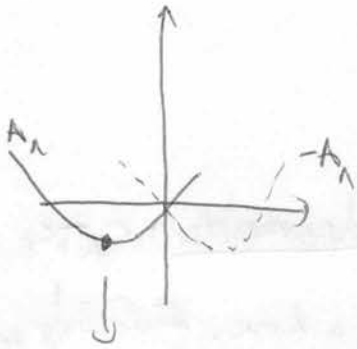
ha $T \approx T_c$ → a rendpar. kicsi

⇓ sorfejtés

$$F = F_0 + A_1\psi + A_2\psi^2 + A_3\psi^3 + \dots$$

$\frac{\partial F}{\partial \psi} = 0$ ⇒ ez fogja a fizikailag megvalósuló rendparamétert megadni

ha van F-ben lin. tag, akkor



nem lehet 0-ban a minimum!

$\Downarrow$

mi van szerintünk, ha 0-ból véges értékre folyt. van merre áll a rendparaméter

$\Downarrow$

$$F = F_0 + \cancel{A_1\psi} + A_2\psi^2 + \cancel{A_3\psi^3} + A_4\psi^4 + \dots$$

$$F = F_0 + A_2\psi^2 + A_4\psi^4$$

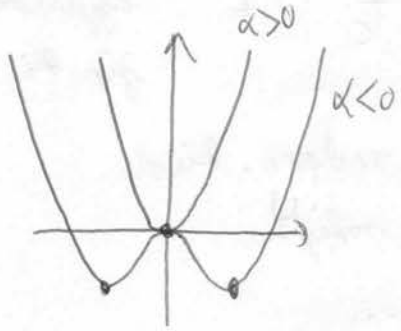
$$F = F_0 + \alpha\psi^2 + \frac{1}{2}\beta\psi^4$$

minimum ezt akarjuk

$$\psi_0 = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \neq 0 & T < T_c \end{cases}$$

tfh.:
$\alpha = A(T - T_c)$

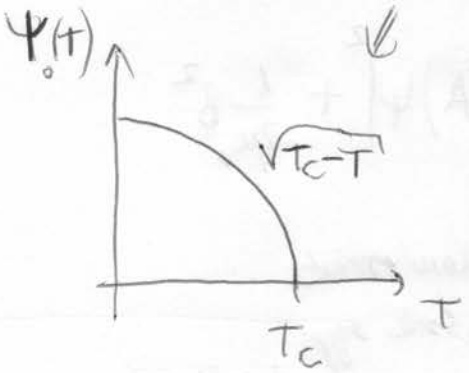
$T > T_c \Rightarrow \alpha > 0$
$\beta > 0$ $\Rightarrow \psi_0 = 0$ ✓



$T < T_c \Rightarrow \alpha < 0 \Rightarrow \psi_0 \neq 0$ ✓

$$F'(\psi)\Big|_{\psi_0} = 2\alpha\psi_0 + 2\beta\psi_0^{\cancel{3}\,2} = 0$$

$$\psi_0^2 = \frac{\alpha}{\beta}, \quad \psi_0^2 \sim T_c - T, \quad \psi_0 \sim \sqrt{T_c - T}$$



Valóságban T_c közül a fluktuációk felerősödnek, ezért a kritikus viselkedés megváltozik $\Rightarrow (T_c - T)^{\beta} \sim \Psi_0(T)$

$\beta \neq \frac{1}{2}$

szupravezetés leírása:

$$F = F_0 + \alpha \Psi^2 + \frac{1}{2}\beta \Psi^4$$

$T < T_c \quad |\Psi_0| \neq 0$

$$f(r) = f_0 + \alpha \Psi^2(r) + \frac{1}{2}\beta \Psi^4(r) + \gamma \underbrace{|\nabla \Psi(r)|}^2$$

szinm. okok miatt

Most mi lesz a rendparaméter?

az energia attól is függ, hogy milyen gyorsan vált. a rendparaméter a hely fv.-ben

2folyj. modell: th. az anyagban van egy szupravezető fázis (kondenzátum) és olyan e^--ok, melyek nem rendeződnek Cooper-párokba $\Rightarrow$ a szupr. fázist a hfv.-el írom le

$$f = f_0 + \alpha |\Psi(r)|^2 + \frac{1}{2}\beta |\Psi(r)|^4 + \gamma \cdot |\nabla \Psi(r)|^2$$

(ez fogja a rendparamétert megadni)

mágneses tér jelenlétében: $\frac{\hbar \nabla}{i} = p \to \left(\frac{\hbar \nabla}{i} + eA\right)$

$$f_0 + \alpha|\psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi|^4 + \frac{1}{2m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e^*A\right)\psi\right|^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2$$

anyagi minőségtől függő elő.

Landau szerint ide csak egy univ. param. került, hogy a mértékinvariancia teljesüljön

$\alpha = A(T - T_c)$

DE $e^* = 2e$ is univerzális!

mikrosz. modellből ez jön ki

(számolás után) 2 egyenletet kapunk:

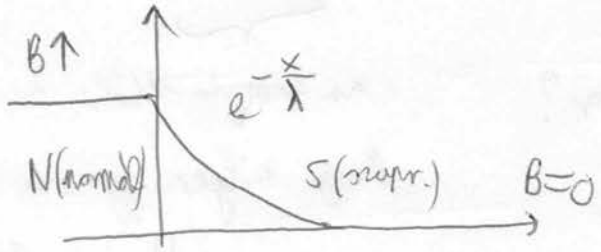
$$\text{I.}\quad \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e^*A\right)^2\psi = 0$$

$$\text{II.}\quad j = -\frac{e^*}{2m}\psi^*\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e^*A\right)}_{\nabla \text{ helyett}}\psi + \underbrace{\text{h.c.}}_{\text{hermit. konj.}}$$

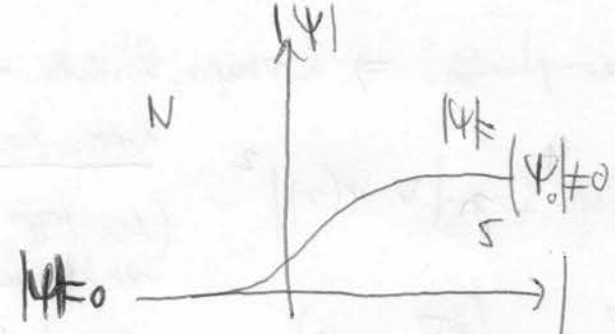
Ginzburg–Landau-egyenletek

szupravezető áram

London-egyenletből: λ karakt. hossz → mágneses tér lecengése



ξ koherenciahossz:



$\alpha\cancel{\psi} + \beta|\psi_0|^2\cancel{\psi} = 0$

$|\psi_0|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}\ (\sim(T - T_c))$

$|\psi_0| = \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}$

~~$\lambda < \xi$~~ itt már $B = 0$

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2\psi = 0 \quad \Big/ : |\psi_0| \qquad \downarrow B=0$$

$$\left(\frac{\psi}{|\psi_0|} := f \qquad \frac{\beta}{|\psi_0|^2} = -\alpha \quad \leftarrow \left(-\frac{\alpha}{\beta} = |\psi_0|^2\right) \right.$$

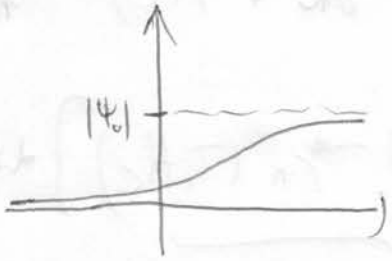
$$\alpha f - \alpha |f|^2 f + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 f = 0$$

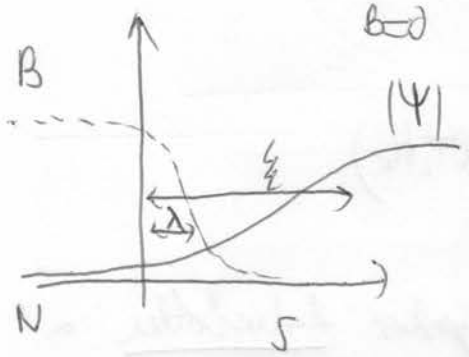
$$f - |f|^2 f + \frac{\hbar^2}{2m\alpha}\nabla^2 f = 0$$

$$\boxed{\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*\alpha}}$$

ma.: $\boxed{f(x) = \mathrm{th}\,\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\,\xi}} \Rightarrow |\psi| = \mathrm{th}\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\,\xi}\right)\cdot|\psi_0|$

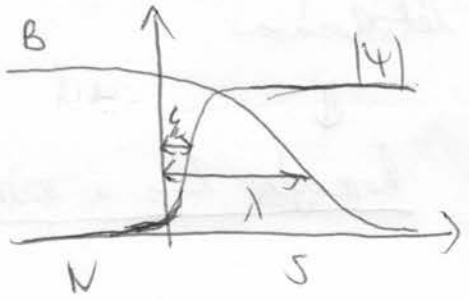
$\Downarrow$





$\xi \gg \lambda$

→ itt az átmeneti tart.-on B hamar leesik, de még nem vagyunk a szupr. tart. ban ⇒ se ~ B-t, se a Cooper-párok nem nyernek energiát



$\xi \ll \lambda$

→ szinte azonnal átmegyek a szupravezető tart. ba az átmeneti tart. ban ⇒ a Cooper-párok és a mágn. térből is nyernek energiát

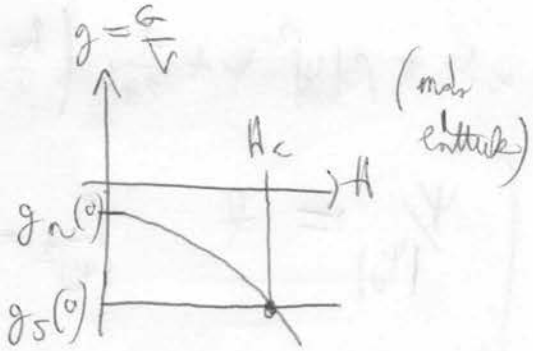
Szándosítva:

$H = H_c - n$ → homogén tart. ban

$$g_s(T, H_c) = g_n(T, H_c)$$

(~~valójában~~ az átm. tartományon inhomogén a rsz., és nem ez a 2 szabadalyos fázis van)

~~de most azt vizsgáljuk~~)



(más értelmezés)

$$f = f_n + \alpha|\psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi|^4 + \frac{1}{2m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e^*A\right)\psi\right|^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2$$

$$g_s = f_n + \quad — \| — \quad + \frac{1}{2\mu_0}B^2 - BH$$

$$g_s(T, H_c) - g_s^{(hom)}(T, H_c)$$

homogén tart. ↕ $g_n(T, H_c) = f_n - \frac{1}{2}\mu H_c^2$ ← normál fázisban $|\psi| = 0$

$$\int \underbrace{\left[g_s(T, H_c) - g_n(T, H_c)\right]}\, dx = \sigma_{ns}$$

ez valahol az átmeneti tart. ban nem 0, a homogén rsz. ben H_c def.-ből $g_s(T, H_c) = g_n(T, H_c)$

belátható, hogy

$$\frac{\lambda}{\xi} = K \begin{cases} < \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \sigma_{ns} > 0 \\ > \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \sigma_{ns} < 0 \end{cases}$$

→ ilyenkor kedvezőtlen a normál - sup. felületek létrehozása

⇓ inhomogén lesz a minta

⇓ homogén lesz a minta

↓

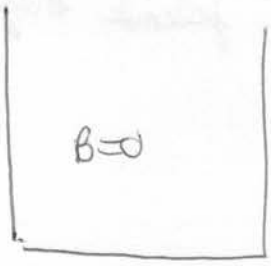
váltakozva jönnek létre

szupravezető és normál

fázisú homogén területek

↓

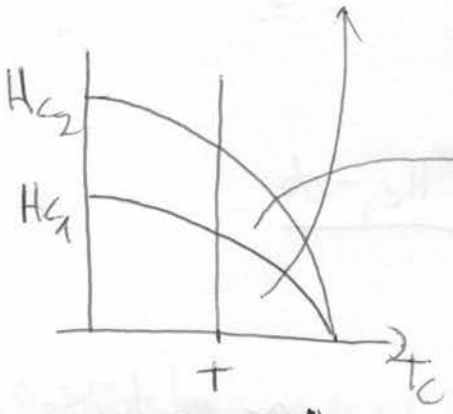
<u>Abrikosov</u>



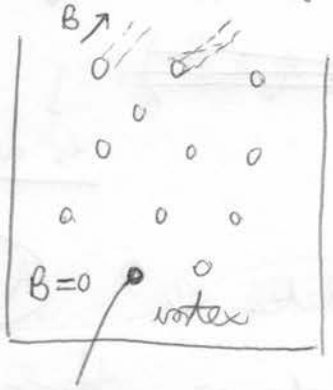
B ⊙

elsőfajú

+ másodfajú, ha $H < H_{c_1}$



vortex csövek jönnek létre

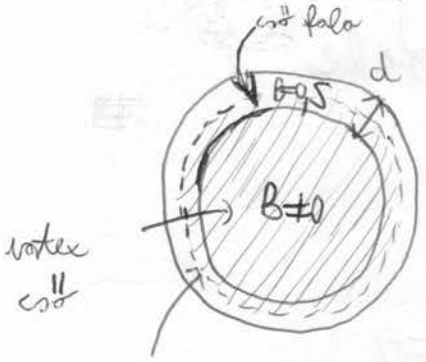


másodfajú,

$H_{c_2} > H > H_{c_1}$

⊙ B

szupravezető tekercs:



$d > 2\lambda$

$B \neq 0$ a vortex csövek belsejében

a cső sugarát λ szabja meg

C kontúr Mekkora lesz a kontúron belül a fluxus?

$$\int B\,dF = \int A\,dl = n\,\phi_0$$

csak a S felületén folyik áram, C-n nem

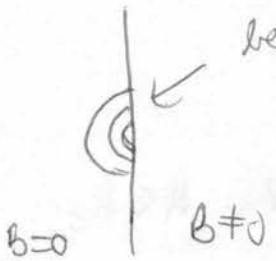
fluxuskvantum

$$\boxed{\phi_0 = \frac{h}{2e}}$$

$\Downarrow$

$\Rightarrow$ $\forall$ vortexben $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$ fluxuskvantum van bezárva, a mintafelületen (és a vortexben) áram folyik

- Mi van, ha növelem a mágn. teret? $(H \simeq H_{c_1})$



belép az első vortex a middala (a felületen jelenik meg)

$$E_{vortex} = M \cdot H = \Phi_0 \cdot H_{c_1}$$

~~$(\Phi_0 \cdot H_{c_1})$~~

$\downarrow$

ez definiálja H_{c_1}-et

- Meddig mehetek el? $(H_{c_1} < H < H_{c_2})$

Ha a vortexek távolsága összemérhető a mérőtükkel, a sz. összeomlik, és átmegy inhomogénbe

- Mi történik, ha $(H \simeq H_{c_2})$

$$\alpha \Psi + \beta \cancel{|\Psi|^2 \Psi} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e^* A\right)^2 \Psi = 0$$

$\uparrow$

$|\Psi|$ kicsi, ezt a tagot már elhagyom

$\downarrow$

ez a Landau-féle egyenlete!

$E = -\frac{\alpha}{\gamma}$ és $\alpha = A(T - T_c)$ rögzített adott T-n, most $\alpha < 0$ $(T < T_c)$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar \frac{e\mu_0 H_{c_2}}{m^*}$$

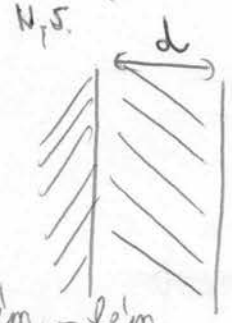
H_{c_2}-t ebből kiszámíthatjuk

$\boxed{\text{Vizsgán}}$: 2 tétel lesz, mindkettőt tudni kell
+ hasikla is belekérezhetnek!

. óra

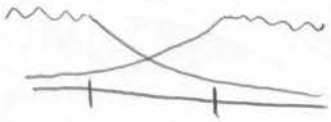
Alagúteffektus

(oxidréteg)



N,S. (normál fém ~~(szuprav.)~~ vagy szupravez.)

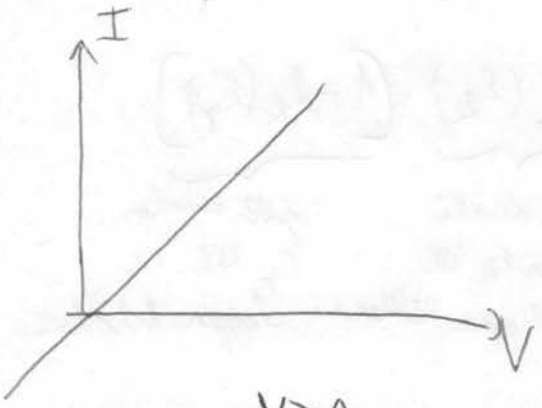
1) fém - fém



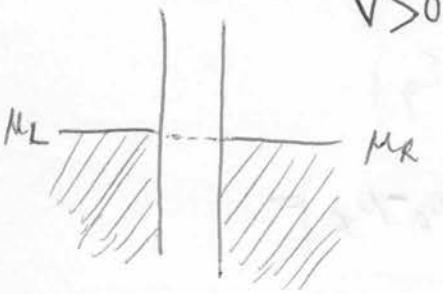
hullámfv.

$\Downarrow$

ha elég vékony az oxidréteg, átalagutaghatnak az e^--k

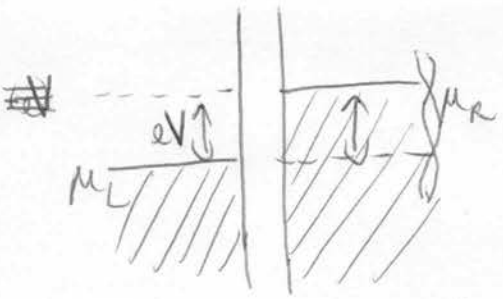


$V>0$



→ ha nincs fesz., akkor kiegyenlítődnek μ-k, egy.-lan áram nem folyik

$V > 0 \Rightarrow -eV$



$\Rightarrow$ a jobb oldali betöltött ~~állapotok~~ átugrottak a bal oldali ~~állapotokba~~

$\Rightarrow$ ohmikus viselkedés várunk

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_R + \underbrace{\mathcal{H}_T}_{\text{átmenet a 2 oldal között}}$$

$$\mathcal{H}_T = \sum_{k,q} \underbrace{T_{kq}}_{\text{mátrixelem}} \left(\underset{L}{c^+_{k\sigma}} \underset{R}{c_{q\sigma}} + \underset{R}{c^+_{q\sigma}} \underset{L}{c_{k\sigma}} \right)$$

az impulzus nem marad meg ($k \neq q$ is lehet), mert megszűnt a transzlációs invariancia

$$I = -e\left(P_{L\to R} - P_{R\to L}\right)$$

véges hőm.-en ez $\neq 0$ (akkor sem, ha $\mu_R > \mu_L$)

$$P_{L\to R} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{kq}|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_q) \cdot \underbrace{f_L(\varepsilon_k)}_{\substack{\text{bal oldali} \\ \text{részen } \varepsilon_k \text{ áll.} \\ \text{ne legyen } \cancel{\text{üres}}}} \cdot \underbrace{\left[1 - f_R(\varepsilon_q)\right]}_{\substack{\text{jobb oldalon} \\ \varepsilon_q \text{ áll. ne} \\ \text{legyen betöltve}}}$$

$\Downarrow$

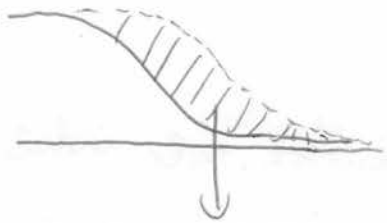
$$I = \ldots |T_{kq}|^2 \cdot \left[f_L(\varepsilon_k) - f_R(\varepsilon_q) \right] \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_q)$$

$\xi_k := \varepsilon_k - \mu_L$

$\xi_q := \varepsilon_q - \mu_L$

$$\Rightarrow \delta(\varepsilon_k - \mu_L + \mu_L - \varepsilon_q + \mu_R - \mu_R) = \delta(\xi_k - \xi_q - eV)$$

$$I = \ldots \left[f(\xi_k) - f(\xi_k - eV) \right]$$

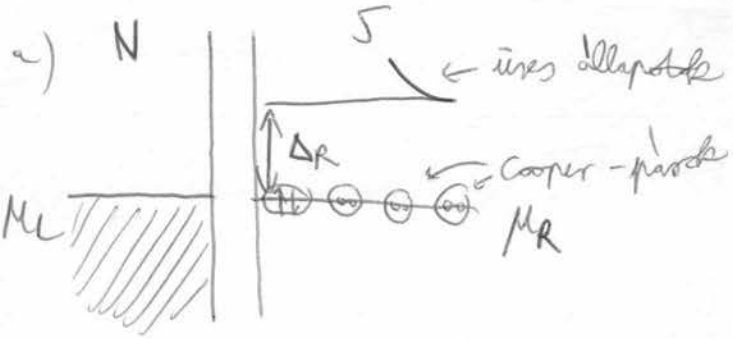


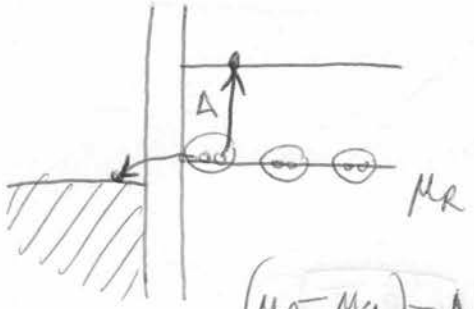
ez adott az járulékot

az integrálási terület $\sim V \Rightarrow$ lineáris fesz. függés /

2) Mi van, ha szupravezető van az egyik oldalon?

a)





ha a Cooper-pár szétszakadna (ehhez Δ_R energia kell), akkor át tudna alagutazni az egyik e^-

↓

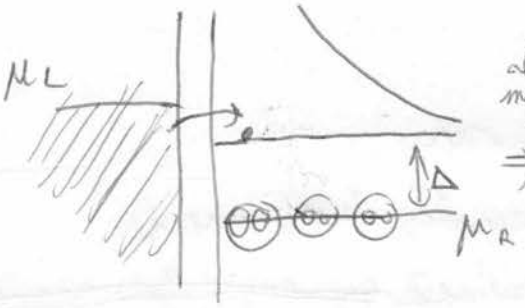
ez nyerhető energiát a pot. különbség miatt

$$(\mu_R - \mu_L) = \Delta_R$$

$$eV_c = \Delta_R$$

b)

⇒ akkor játszódhat le elvileg a jelenség, ha ≥ 0 az energianyereség

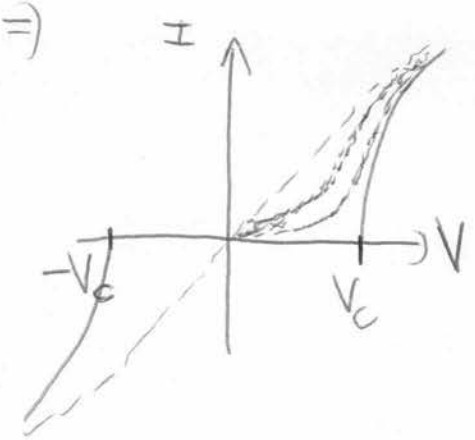


ahhoz, hogy most át tudjon belőle menni az e^-, annyival kell megemelni a kémiai potenciált (μ_L), hogy eléje szupravez. kontinuum szintjét

$\Rightarrow (\mu_L - \mu_R) = \Delta$ -nál játszódhat le szintjét

ez a folyamat

⇒

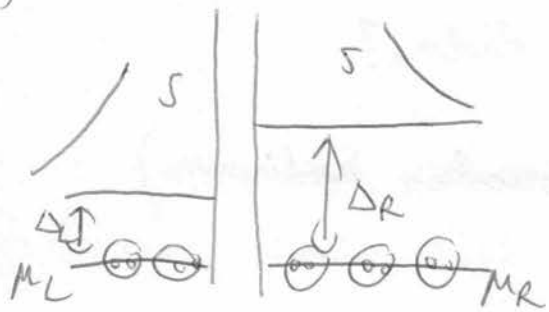


..... véges T

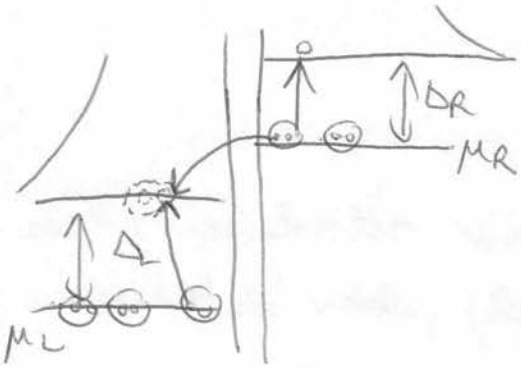
— T=0

⇒csak egy kritikus fesz.-nél indul meg a vezetés, ekkor viszont a nagy állapotsűrűség miatt nagy árammal

c) szupravezető - szupravezető

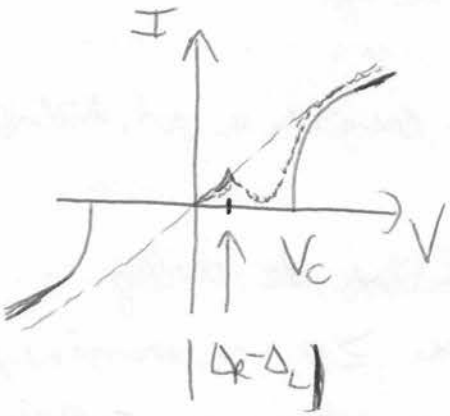


V=0



$V \neq 0$

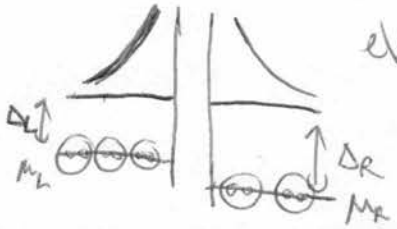
$$\boxed{eV_c = \Delta_L + \Delta_R}$$



.... mérés $\boxed{\text{véges T}}$

— várakozás (fenti meggondolás)

van egy tipikus $|\Delta_R - \Delta_L|$-nél véges hőm.-en:



$eV = \Delta_R - \Delta_L$ ⇒ az egyrészecskés kontinuumok aljai összeérnek ~~(⇒ megindulhat az áram)~~

2) Josephson-effektus

Átmehetnek-e párok S || S elrendezésben?

Ψ S | | S
Ψ_L | | Ψ_R

kihasználjuk, hogy az e^--oknak lehet fázisa a szupravezetőben

$$\Psi_L = |\Psi_L| \cdot e^{i\phi_L}$$
$$\Psi_R = |\Psi_R| \cdot e^{i\phi_R}$$

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi_L &= \mu_L \Psi_L \\ -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi_R &= \mu_R \Psi_R \end{aligned}\right\} \text{ez lenne átmenet nélkül}$$

csatolással: (Feynman javaslata)

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi_L = \mu_L \Psi_L + T\Psi_R$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi_R = \mu_R \Psi_R + T\Psi_L$$

fázisokat feltéve ~~(az egy. rsz. megoldásnak)~~:

$$\frac{\partial |\Psi_L|}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} T \cdot |\Psi_R| \cdot \sin(\phi_R - \phi_L)$$

$$\frac{\partial |\Psi_R|}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} T \cdot |\Psi_L| \sin(\phi_R - \phi_L)$$

$$\frac{\partial \phi_L}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar}\mu_L - \frac{1}{\hbar} T \cdot \frac{|\Psi_R|}{|\Psi_L|} \cos(\phi_R - \phi_L)$$

$$\frac{\partial \phi_R}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar}\mu_R - \frac{1}{\hbar} T \cdot \frac{|\Psi_L|}{|\Psi_R|} \cos(\phi_R - \phi_L)$$

Mekkora áram folyhat?

$$\frac{d}{dt}|\psi_L|^2 \Rightarrow j = -e^* \frac{d}{dt}|\psi_L|^2 = -\frac{2e^*}{\hbar}|\psi_L|\, T\, |\psi_R| \sin(\varphi_R - \varphi_L) \sim$$

$$\sim \sin(\varphi_L - \varphi_R)$$

$$\frac{d}{dt}(\varphi_L - \varphi_R) = \frac{1}{\hbar}(\mu_R - \mu_L)$$

~~(ha a két szupravezető azonos $\Rightarrow \mu_R = \mu_L \Rightarrow \varphi_L - \varphi_R = \text{konst}$).~~

$$e^* V = \mu_R - \mu_L$$

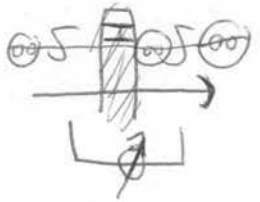
~~ideiglenes~~

i) <u>V=0</u> $\varphi_L - \varphi_R = \text{const.}$

$\Rightarrow I \neq 0$ áram folyhat

de magától nem folyik áram, pótolni kell a feszültséghordozókat

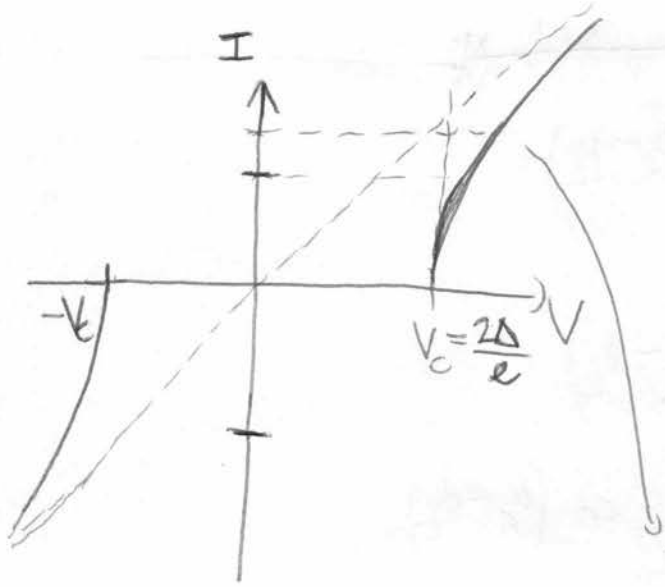
↳ áramgenerátor



SIS

NIS

V=0, de áram folyik!



⇒ egyre áramot tudunk átvinni feszültségesés nélkül egy bizonyos határig

nagyobb áramot már fesz. eséssel tudok csak átvinni

ii) véges feszültségű fázist

$$\frac{d}{dt}(\varphi_L-\varphi_R) = \frac{1}{\hbar}(\mu_R-\mu_L) \quad \cancel{\sin(\varphi_L-\varphi_R)} \qquad \varphi_L-\varphi_R = \frac{e^*}{\hbar}Vt$$

$j \sim \sin\left(\frac{e^*}{\hbar}Vt\right)$

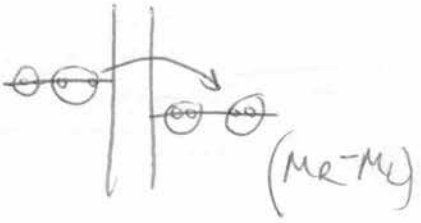
↳ áram sinusosan modulálódik egyenfesz. hatására

$$eV_c = \Delta_L + \Delta_R$$

$$\gamma = \frac{2e}{\hbar}V = \frac{V}{\Phi_0}$$

↑

ilyen frekvenciájú sugárzást bocsát ki a Josephson-átmenet



⇒ a váltóáram mellett egy mikrohullámú tér is megjelenik

iii) $V = V_0 + V_w \cos wt$

$$\cos(a\cdot\sin wt) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(a)\cdot\cos(n\cdot wt)$$

$$\sin(a\cdot\sin wt) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \underbrace{J_n(a)}_{\text{n. rendű Bessel-fv.}} \sin(wt\cdot n)$$

⇒ ezt a kifejtést kell alkalmazni

mivel $\varphi_L-\varphi_R \sim \sin wt$ ~~cos wt~~

kifejtés

⇒ $I \sim \sin(\varphi_L-\varphi_R) \sim \sin(a\sin wt) + \cos(a\sin wt)$

⇒ az áramban w és felharmonikusai jelennek meg

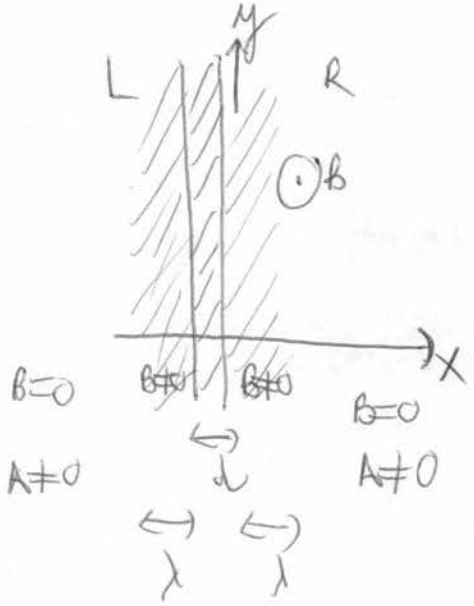
$$I = I_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n J_n\left(\frac{2eV_\omega}{\hbar\omega}\right) \sin\left[\delta\varphi_0 + \underbrace{\left(\frac{2eV_0}{\hbar} - n\omega\right)}_{=0} t\right]$$

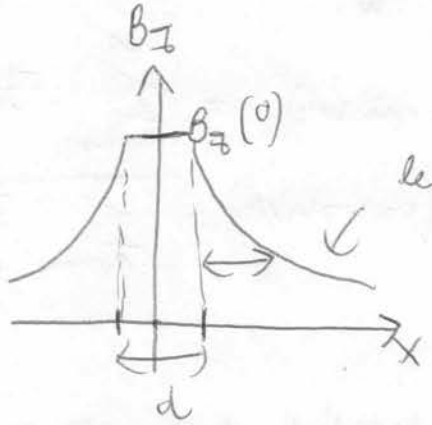
ez adja meg a konstans tagot

(váltóáramú Josephson-effektus)

3) Mi van, ha mágneses teret is alkalmazunk? tovább is

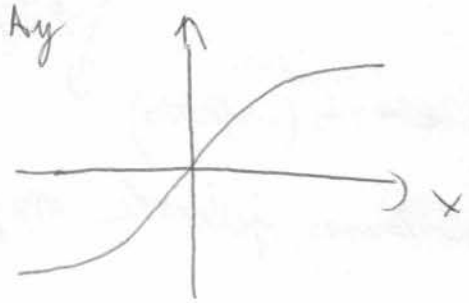
(J || J elrendezés)





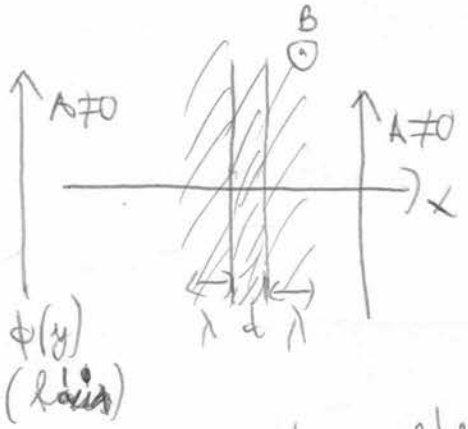
lecseng a mágn. ⇓ a szupr.v.-ben λ karakt. hosszal

de a vektorpot. nem 0 ⇒ a fázis tudja változtatni!

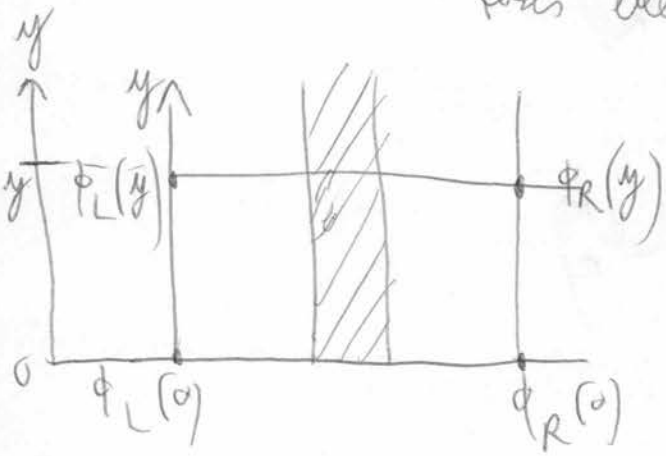


II. Ginzburg-Landau-egyenletek

$$\nabla \phi = -\frac{e^*}{\hbar} A$$



de a kétoldalon A ellentétes előjelű ⇒ a fázis ellentétes irányba változik



áram:

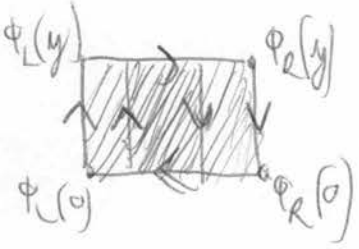
$\to \sin(\phi_L(y) - \phi_R(y))$

$\to \sin(\phi_L(0) - \phi_R(0))$

⇓

nem mindenhol nulla áram folyik!

Mérésből a fáziskülönbséget megkeresni lehet, mert:



$$I \sim \oint A\,ds = \int B\,dA \quad \text{(fluxus)}$$

⇓

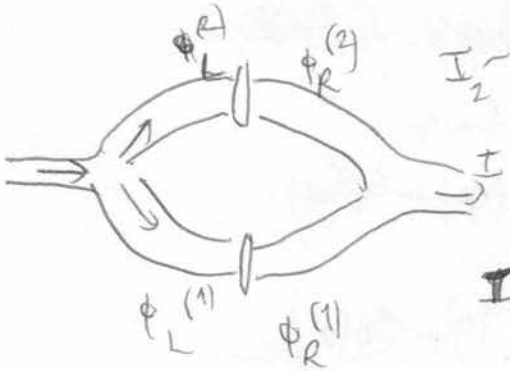
a lezárt fluxussal arányosan változik az áram

$$\phi_L(y) - \phi_R(y) \sim y$$

⇒ y-ban sin-ban változik az áram

Alkalmazás: Josephson-diódák

~~Milyen gyakorlati haszna van?~~



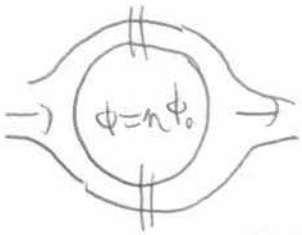
$I_2 \sim \sin\left(\phi_L^{(2)} - \phi_R^{(2)}\right)$

$I_1 \sim \sin\left(\phi_L^{(1)} - \phi_R^{(1)}\right)$

$$I = I_1 + I_2$$

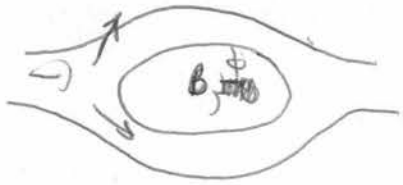
- ha van B_{ext}:

mágneses fluxuskvantálás, mert nincs ~~teljes~~ összefüggő ~~szál~~ szál



lezárt mágneses fluxus

$\phi_{\text{fluxus}} = \Delta\phi^{(1)} - \Delta\phi^{(2)}$



- interferencia ez is jelenség

SQUID