Szilárdtest-fizika gyakorlat

Bácsi Ádám, Kanász-Nagy Márton, Kézsmárki István

Tartalomjegyzék

1. Kristályszerkezet **2**
- 1.1. Rács, elemi rácsvektorok . . . 2
- 1.2. Reciprok rács . . . 4
- 1.3. Nevezetes rácsok . . . 5
  - 1.3.1. Egyszerű köbös rács . . . 5
  - 1.3.2. Tetragonális rács . . . 5
  - 1.3.3. Térben centrált köbös rács (bcc) . . . 7
  - 1.3.4. Perovszkit szerkezet . . . 7
  - 1.3.5. Gyémánt és GaAs . . . 8
  - 1.3.6. Spinell szerkezet . . . 8
- 1.4. Kristálysíkok . . . 9
- 1.5. Házi feladatok . . . 11

2. Kristályok forgatási és tükrözési szimmetriái **12**
- 2.1. Kétdimenziós szimmetriaműveletek . . . 12
- 2.2. Neumann-elv . . . 14
- 2.3. Példa feladatok Neumann-elv alkalmazására . . . 15
  - 2.3.1. Háromfogású forgatás két dimenzióban . . . 15
  - 2.3.2. Tükrözés két dimenzióban . . . 15
  - 2.3.3. Négyfogású forgatási szimmetria három dimenzióban . . . 16
  - 2.3.4. Négyindexes tenzorok szimmetriái (Hooke-tenzor) . . . 17
  - 2.3.5. Ferroelektromosság és ferromágnesség megjelenésének szimmetria feltételei . . . 18
  - 2.3.6. Ferroelektromosság és ferromágnesség kristályokban . . . 20
  - 2.3.7. Köbös rács deformációja . . . 21
- 2.4. Házi feladatok . . . 22

3. Rugalmas szórás kísérletek **23**
- 3.1. Rácsösszeg . . . 24
- 3.2. Atomi szórási tényező . . . 24
  - 3.2.1. Atomi szórási tényező 1s pályák esetén . . . 25

3.3. Szerkezeti tényező . . . 26
3.3.1. Szerkezeti tényező grafénrácsban . . . 26
3.4. Porminta szórási képe . . . 27
3.4.1. Köbös rács szórási képe . . . 27
3.4.2. Lapcentrált köbös rács szórási képe . . . 28
3.4.3. Kétdimenziós háromszögrács . . . 28
3.5. Példa feladatok rugalmas szóráskísérletekre . . . 29
3.5.1. Réz-oxid sík szórási képe . . . 29
3.5.2. Gyémánt és GaAs szerkezeti tényezője . . . 31
3.5.3. Kétdimenziós háromszögrács szórási képe . . . 33
3.5.4. Rácstorzulás jele szóráskísérletekben . . . 35
3.5.5. Szerkezeti tényező köbös kristályban . . . 36
3.5.6. Összetett bázisú kristály szerkezeti tényezője . . . 38
3.5.7. Perovszkit kristályszerkezet . . . 39
3.5.8. Tércentrált köbös rács szórási képe . . . 40
3.6. Házi feladatok . . . 42

4. Debye-Waller-faktor, véletlen ötvözetek szórási képe 44
4.1. Debye-Waller-faktor . . . 44
4.2. Véletlen (híg) ötvözetek . . . 45
4.2.1. Véletlen ötvözet hatszögrácson . . . 46

5. Rácsrezgések 49
5.1. Harmonikus közelítés . . . 49
5.2. Rácsrezgések rugós modellje . . . 51
5.3. Példa feladatok a rugós modell alkalmazására . . . 52
5.3.1. Feszítetlen négyzetrács síkbeli rezgései elsőszomszéd kölcsönhatásokkal . . . 52
5.3.2. Feszített négyzetrács síkbeli rezgései elsőszomszéd kölcsönhatásokkal 53
5.3.3. Feszítetlen négyzetrács síkbeli rezgései másodszomszéd kölcsönhatásokkal . . . 55
5.3.4. Kétatomos elemi cellájú egydimenziós lánc . . . 56
5.3.5. Különböző tömegű atomokból álló egydimenziós lánc . . . 58
5.3.6. Szennyezők hatása a rácsrezgésekre . . . 60
5.3.7. Rácsrezgések jele a szórási képben . . . 62
5.3.8. Hatszögrács rácsrezgései . . . 64
5.3.9. Spinell szerkezetű kristály . . . 66
5.4. Házi feladatok . . . 67

6. Fononok állapotsűrűsége **69**
6.1. Debye-modell . . . 70
6.2. Állapotsűrűség feszített négyzetrács esetén . . . 71
6.3. Példa feladatok állapotsűrűség számítására . . . 72
6.3.1. Debye-modell jégben . . . 72
6.3.2. Debye-modell hiperköbös rácsban . . . 73
6.3.3. Optikai fononok állapotsűrűsége . . . 74
6.4. Rács megolvadása . . . 75
6.5. Házi feladatok . . . 78

7. Elektronok Dirac-delta potenciálsorban **79**
7.1. Elektronok rácsperiodikus potenciálban . . . 79
7.2. Dirac-delta potenciálsor egy dimenzióban . . . 80
7.2.1. Tiltott sáv nagyságának kiszámítása gyenge potenciál esetén . . . 82
7.2.2. Legalacsonyabb energiájú állapot gyenge potenciál esetén . . . 84
7.2.3. Sávszélesség erős rácspotenciál esetén . . . 84

8. Közel szabad elektronok diszperziós relációja (egy dimenzió) **86**
8.1. Közel szabad elektron közelítés . . . 87
8.2. Közel szabad elektron közelítés - degenerációs pontok egy dimenzióban . . . 89
8.3. Példa feladatok közel szabad elektron közelítésre egy dimenzióban . . . 89
8.3.1. Tiltott sáv számolása . . . 89
8.3.2. Tiltott sávok . . . 91
8.3.3. Négyszög potenciál . . . 92
8.4. Házi feladatok . . . 93

9. Közel szabad elektronok diszperziós relációja (két dimenzió) **95**
9.1. Degenerációs pontok helye a hullámszámtérben . . . 95
9.2. Közel szabad elektron közelítés kétdimenziós négyzetrácson . . . 96
9.2.1. Szimmetria megfontolások . . . 96
9.2.2. Szabad elektronok diszperziós relációja . . . 96
9.2.3. Degeneráció felhasadása . . . 98
9.2.4. Példa feladat közel szabad elektron közelítésre három dimenzióban 101
9.3. Házi feladatok . . . 102

10. Elektronok energiaspektruma szoros kötésű közelítésben **103**
10.1. Szoros kötésű közelítés egyetlen atomi pálya figyelembe vételével . . . 104
10.1.1. Spektrum s pályák esetén egy dimenzióban . . . 106
10.1.2. Spektrum p pályák esetén egy dimenzióban . . . 106
10.1.3. Kétdimenziós derékszögű (tetragonális) rács . . . 106
10.2. Szoros kötésű közelítés több atom esetén . . . 108

10.2.1. Grafén . . . 110
10.2.2. Bór-nitrid . . . 111
10.2.3. Szén nanocsövek . . . 112
10.3. Példa feladatok szoros kötésű közelítésre . . . 114
10.3.1. Effektív tömeg és Fermi-felület négyzetrácsban . . . 114
10.3.2. Vezetőképesség négyzetrácsban . . . 115
10.3.3. Tetragonális rács . . . 118
10.4. Házi feladatok . . . 121

11. Elektronok állapotsűrűsége **122**
11.1. Hullámszámtérbeli állapotsűrűség . . . 122
11.2. Állapotszám és energiafüggő állaptsűrűség . . . 122
11.2.1. Szabad elektrongáz . . . 123
11.2.2. Kétdimenziós négyzetrács . . . 124
11.3. Fermi-tenger alapállapot . . . 124
11.4. Bethe-Sommerfeld-sorfejtés . . . 125
11.5. Példa feladatok elektronok állapotsűrűségének számolására . . . 126
11.5.1. Kétdimenziós háromszög rács . . . 126
11.5.2. Tércentrált köbös rács . . . 127
11.5.3. Grafén fajhője . . . 129
11.5.4. Félvezetők állapotsűrűsége . . . 131
11.5.5. Vezetőképesség fémekben . . . 132
11.5.6. Egy részecskére jutó energia szabad elektron gázban . . . 134
11.6. Házi feladatok . . . 135

A jegyzet a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem fizika alapszakán kötelező Szilárdtestfizika gyakorlat hallgatói számára készült. A gyakorlat egész féléves anyaga mellett számos példa feladat is kidolgozásra került. Ajánlott irodalom Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai I. és II. kötete (a jegyzetben található hivatkozások a második, bővített kiadás fejezetszámaira vonatkoznak). A témakörök elején található elméleti bevezetők is nagyban erre a forrásra támaszkodnak.

A jegyzet tematikailag csak irányadó, nem pótolja a gyakorlaton való részvételt. Megjegyzéseket, észrevételeket a bacsi@dept.phy.bme.hu címre várunk.

1. fejezet

Kristályszerkezet

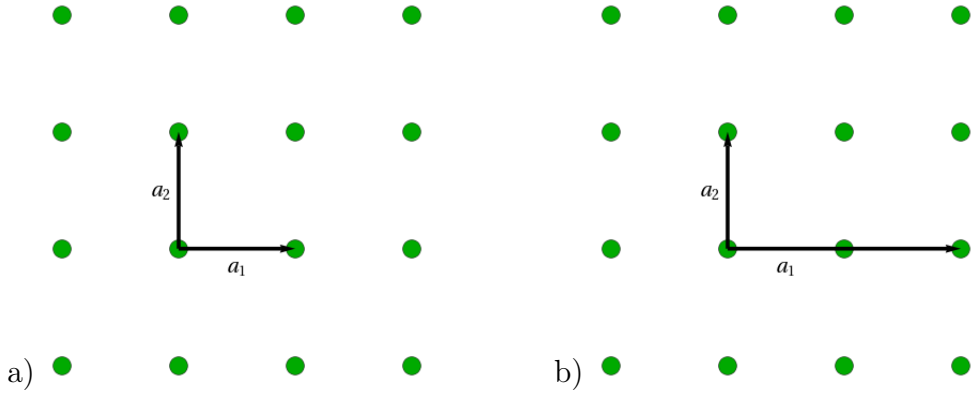
1.1. Rács, elemi rácsvektorok

Kristályos anyagnak nevezzük azokat a szilárd anyagokat, melyek térben periodikusak, vagyis amelyek diszkrét eltolási szimmetriával bírnak. Egy kristályos anyag összes eltolási szimmetriája csoportot alkot. Az eltolási szimmetriákon kívül más szimmetriák is előfordulhatnak a rendszerben (forgatások, tükrözések, inverzió), ezekkel később foglalkozunk. Az eltolási csoport elemeit reprezentálhatjuk az eltolások valós térbeli vektoraival (ekkor a csoportszorzás a vektorok összeadása lesz), az $\mathbf{R}_n$ rácsvektorokkal. Elemi rácsvektorok azok az $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ vektorok, melyekből ha képezzük az összes lehetséges

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

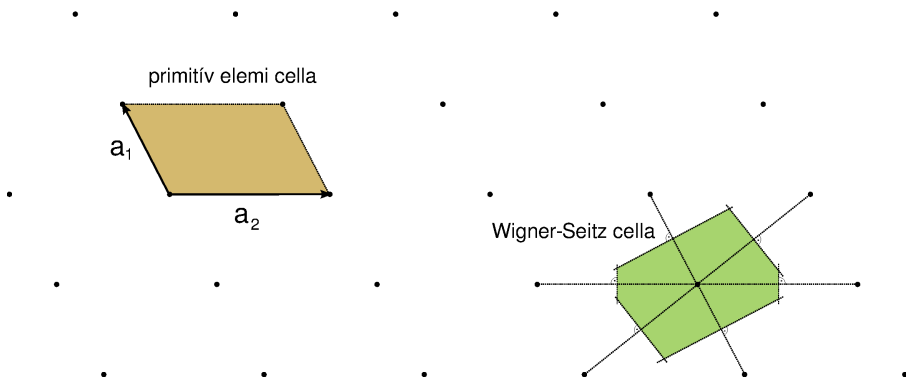
lineáris kombinációt, ahol n_1, n_2 és n_3 tetszőleges egész számok, akkor minden rácsvektort pontosan egyszeresen kapunk meg (csoportelméleti megközelítésben: $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ generátora az eltolások alkotta csoportnak). A kristály periodikus szerkezetén azt értjük, hogy az invariáns az $\mathbf{R}_n$ rácsvektorokkal történő eltolásra. Ha például a kristály egyik atomja az $\mathbf{r}$ helyen van, akkor az $\mathbf{r} + \mathbf{R}$ helyen ugyanolyan atom található. Hasonlóképpen, a kristály $\rho(r)$ elektronsűrűsége invariáns a rácseltolásokra: $\rho(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \rho(\mathbf{r})$. A rácsvektorok végpontjai egy ponthalmazt alkotnak (lásd 1.1.a ábra), melyet kristályrácsnak, pontrácsnak, Bravais-rácsnak vagy röviden csak rácsnak nevezünk. A rácsvektorokon kívül nincs olyan vektor, amellyel történő eltolásra a kristály invariáns. Nem mindig egyszerű egy adott kristály elemi rácsvektorainak megtalálása. Tekintsük például azt a csoportot, melyet a $2\mathbf{a}_1$ és $\mathbf{a}_2$ vektorok generálnak (1.1.b ábra). Ezen csoport tetszőleges elemével történő eltolásra a kristály invariáns, de nem tartalmazza a kristályrács összes eltolási szimmetriáját. A rács elemi rácsvektorait úgy kell meghatározni, hogy az $\{n_1, n_2, n_3\}$ számhármasokkal előállított lineáris kombinációk pontosan egyszeresen adják meg az összes eltolás vektorát.

A kristály elemi cellája az a tartomány (test), melyet valamennyi rácsvektorral eltolva a teljes kristályt pontosan egyszeresen fedjük le. Az elemi cella szokásos (de nem egyetlen



1.1. ábra. a) Jól megválasztott elemi rácsvektorok. b) Rosszul megválasztott vektorok. Az egész számpárokkal képzett lineáris kombinációk nem adják vissza az összes eltolást, amelyre a rács invariáns.

lehetséges) választása az elemi rácsvektorok által kifeszített parallelepipedon. Ugyanazt a rácsot leírhatjuk más elemi rácsvektorokkal is, pl. $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ helyett használhatjuk az $\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_2$ bázisvektorokat, melyek egy másik, egyező térfogatú elemi cellát feszítenek ki. Az elemi cella megválasztásának másik gyakori módja az ún. Wigner-Seitz-cella, amely azon pontok halmaza, melyek közelebb vannak egy kiválasztott rácsponthoz, mint bármelyik más rácsponthoz. Szerkesztését a 1.2. ábra szemlélteti. Az elemi cella tartalma (atomok, elektronok) a kristály ismétlődő szerkezeti eleme, amelyet bázisnak nevezünk. Ha a bázis egyetlen atomot tartalmaz, akkor a rácspontok megadják az atomi koordinátákat. Ez természetesen nem igaz abban az esetben, ha a bázis több atomot tartalmaz.



1.2. ábra. Egy ferdeszögű rács primitív elemi cellája és Wigner-Seitz cellája.

1.2. Reciprok rács

A kristályt jellemző fizikai mennyiségek sok esetben rácsperiodikusak, vagyis $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n)$ minden $\mathbf{R}_n$ rácsvektorra. A fizikai mennyiség Fourier-transzformáltja

$$F(\mathbf{k}) = \int \mathrm{d}^3 r\, e^{-i\mathbf{kr}} f(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3 r\, e^{-i\mathbf{kr}} f(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{kR}_n} F(\mathbf{k})\,.$$

$$F(\mathbf{k})\left(1 - e^{i\mathbf{kR}_n}\right) = 0$$

Az $F(\mathbf{k})$ Fourier-komponens csak akkor nem tűnik el, ha $e^{i\mathbf{kR}_n} = 1$ minden $\mathbf{R}_n$ rácsvektorra. Ezek szerint minden rácsvektorra $\mathbf{kR}_n = 2\pi M$ kell teljesüljön valamilyen egész M számmal. Az ilyen $\mathbf{k}$ hullámszámokat a rács reciprokrács-vektorainak nevezzük. A továbbiakban a reciprokrács-vektorokat általában $\mathbf{G}$-vel jelöljük. Fontos megjegyezni, hogy a reciprokrács-vektorok hullámszám vektorok, vagyis dimenziójuk m^{-1}.

Tekintsük a $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ és $\mathbf{b}_3$ vektorokat úgy, hogy $\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ teljesüljön az $\mathbf{a}_j$ elemi rácsvektorokkal. Ekkor a $\mathbf{b}_i$ vektorokat elemi reciprokrács-vektoroknak nevezzük. Kiszámításukhoz tekintsük az elemi rácsvektorokból képzett

$$\mathbf{A} = \left(\begin{array}{c|c|c} & & \\ \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \\ & & \end{array}\right)$$

mátrixot, melynek invertálásával kiszámíthatjuk azt a $\mathbf{B}$ mátrixot, melyre $\mathbf{AB} = 2\pi\mathbf{I}$. Az elemi reciprokrács-vektorokat

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \end{pmatrix}$$

alapján határozhatjuk meg. Az elemi reciprokrács-vektorok segítségével minden reciprokrács-vektor felírható

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

alakban, ahol $h, k, l \in \mathbb{Z}$. Megjegyezzük, hogy az elemi reciprokrács-vektorok függnek az elemi rácsvektorok választásától. Azonban ha képezzük az összes h, k, l egész számhármas segítségével a $\mathbf{G}_{hkl}$ reciprokrács-vektorokat, akkor mindig ugyanarra a reciprok rácsra jutunk. A valódi rácshoz a reciprok rács egyértelműen létezik. (Ez a kapcsolat hasonlít egy vektortér és duálisa közöttire.)

A reciprok rács Wigner-Seitz celláját Brillouin-zónának nevezzük. A későbbiekben a Brillouin-zóna fontos szerepet fog játszani a kristályos anyagok leírásában.

1.3. Nevezetes rácsok

Bevezetésként megvizsgálunk néhány olyan nevezetes rácsot, mely a természetben található kristályok esetén gyakran előfordul. Megkeressük ezen rácsok elemi rácsvektorait és meghatározzuk a reciprokrács-vektorokat is. A rácsok szisztematikus osztályozását a következő fehezetben tárgyaljuk.

A továbbiakban nevezetes rácsok elemi rácsvektorait és reciprokrács-vektorait fogjuk bemutatni.

1.3.1. Egyszerű köbös rács

A polónium úgynevezett egyszerű köbös rácsot alkot, melyben a szomszédos rácspontok egy kocka csúcsain helyezkednek el a 1.3. ábrán bemutatott módon. Elemi rácsvektoroknak az

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_3 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

vektorokat választjuk. Ezek alapján képezhetjük az

$$\mathbf{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{és} \qquad \mathbf{B} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrixokat, vagyis az elemi reciprokrács-vektorok

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

amely vektorok egy egyszerű köbös rácsot generálnak a hullámszámtérben. (Irodalom: Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai I. 7.2. fejezet)

1.3.2. Tetragonális rács

Az egyszerű köbös rácsot a fent választott elemi rácsvektorok közül az egyik irányába megnyújtva jutunk az egyszerű tetragonális rácshoz, mely például a következő anyagokra jellemző: $CdIn_2Se_4$, $CuCr_2O_4$. Elemi rácsvektoroknak az

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_3 = b \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

1.3. ábra. A háromdimenziós, egyszerű köbös rács elemi rácsvektorai, elemi cellája és elemi reciprokrács-vektorai.

vektorokat választjuk. Ezek alapján képezhetjük az

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \qquad \text{és} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\pi}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{b} \end{pmatrix}$$

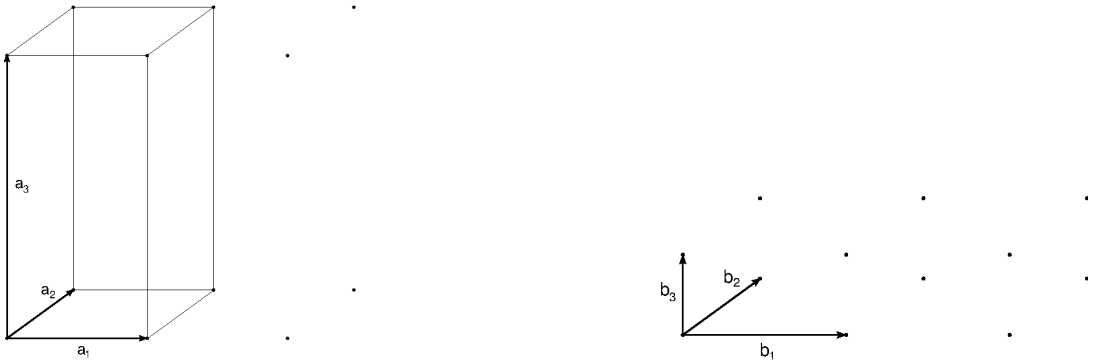
mátrixokat, vagyis az elemi reciprokrács-vektorok

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{b} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

A tetragonális rácsot és a reciprok rácsot a 1.4. ábrán ábrázoltuk.



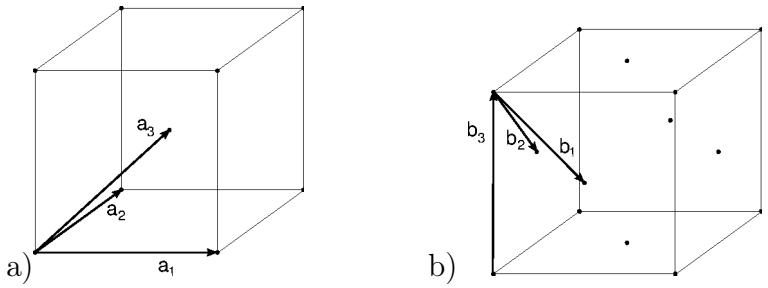
1.4. ábra. A háromdimenziós, egyszerű tetragonális rács elemi rácsvektorai, elemi cellája és elemi reciprokrács-vektorai.

1.3.3. Tércentrált köbös rács (bcc)

Tércentrált köbös ráccsal, melyben a szomszédos rácspontok egy kocka csúcsaiban és a kocka középpontjában találhatók az 1.5. ábrának megfelelően, rendelkeznek például a következő anyagok: Li, Na, K, Cr. Ha az elemi rácsvektorokat a 1.5. ábrán látható módon választjuk meg, akkor

$$\mathbf{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \qquad \text{és} \qquad \mathbf{B} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

A $\mathbf{B}$ mátrix sorvektorai az elemi reciprokrács-vektorok, melyek egy lapcentrált köbös rácsot generálnak.



1.5. ábra. a) A tércentrált köbös rács elemi rácsvektorai, és Bravais cellája. b) A tércentrált köbös rács reciprok rácsa lapcentrált köbös lesz. Az elemi reciprokrács-vektorok $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ és $\mathbf{b}_3$.

Ha az elemi rácsvektorokat a 1.6. ábra szerint vesszük fel, akkor az

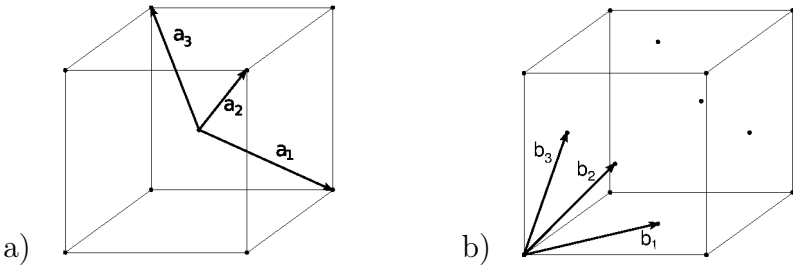
$$\mathbf{A} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{és} \qquad \mathbf{B} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrixokra jutunk, vagyis a reciprok rács ekkor is ugyanaz a lapcentrált köbös lesz.

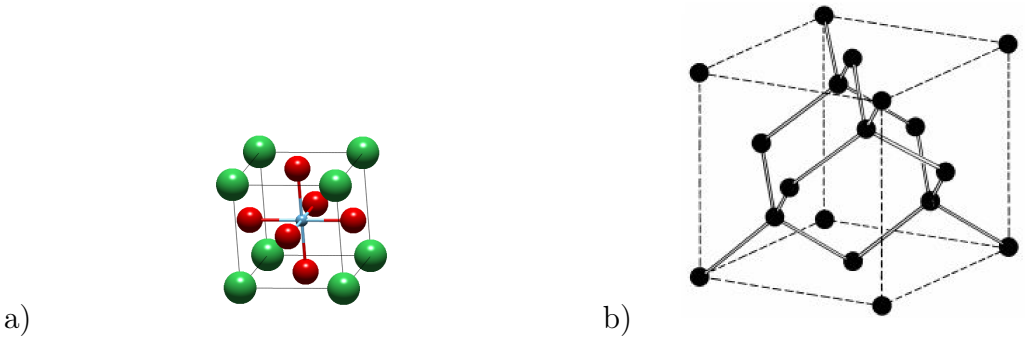
(Irodalom: Sólyom Jenő: A modern szilárdtestfizika alapjai I. 7.2. fejezet)

1.3.4. Perovszkit szerkezet

A köbös perovszkit szerkezet Bravais-cellája a 1.7. ábrán látható. A kristály elemi cellája 5 atomot tartalmaz. A perovszkitok összegképlete tipikusan ABO_3 alakban írható, ahol A és B valamilyen anionok (pl.: $CaTiO_3$). A rácsszerkezet egyszerű köbös, ezért a reciprok rácsa is megegyezik az egyszerű köbösével.



1.6. ábra. a) A tércentrált köbös rács elemi rácsvektorai, és Bravais cellája. b) A tércentrált köbös rács reciprok rácsa lapcentrált köbös lesz. Az elemi reciprokrács-vektorok $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ és $\mathbf{b}_3$.



1.7. ábra. a) Perovszkit szerkezet. b) Gyémántrács.

1.3.5. Gyémánt és GaAs

A gyémánt és a GaAs kristályrácsa is lapcentrált köbös. Mindkét kristály elemi cellája két atomot tartalmaz úgy, hogy ha az egyik atom a kocka alakú Bravais-cella egyik csúcsában helyzkedik el, akkor a másik atom az ezen csúcshoz tartozó testátló negyedelőpontjába esik. A cella egyik atomjából a másikba mutató vektor a lapcentrált rács szokásos elemi rácsvektoraival az alábbi módon írható fel.

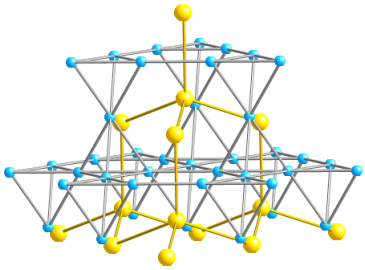
$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3}{4}$$

A gyémánt és a GaAs között egyedül az a különbség, hogy míg a gyémánt esetén az elemi cella mindkét atomja szén atom, addig GaAs esetén az egyik Ga, a másik pedig As. Ennek a különbségnek a szórási kísérletekben lesz fontos szerepe.

1.3.6. Spinell szerkezet

A spinell szerkezetű kristályok rácsa lapcentrált köbös rács. A bázis 7 atomot tartalmaz. A spinellek összegképlete tipikusan AB_2O_4. Eredetileg a $MgAl_2O_4$ ásványt nevezték

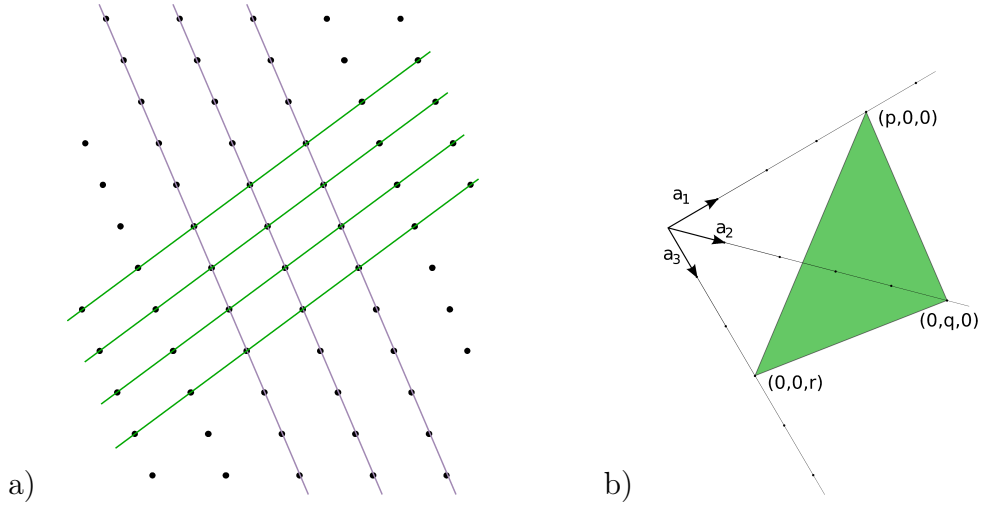
spinellnek, később erről nevezték el az anyagok ezen csoportját. Egy másik példa a spinell szerkezetű anyagokra a magnetit Fe_3O_4, amely mágneses tulajdonságai miatt érdekes.



1.8. ábra. Spinell szerkezet. Az ábrán az átláthatóság kedvéért csak az A (sárga) és B (kék) típusú fém atomokat tüntettük fel.

1.4. Kristálysíkok

Egy rácsban kristálysíkot jelöl ki bármely három, nem egy egyenesre eső rácspont. Az eltolási szimmetria miatt mindegyik kristálysíkon végtelen sok rácspont van. Tetszőleges kristálysík esetén a rács összes rácspontja rajta van valamely, az ezzel párhuzamos kristálysíkok valamelyikén.



1.9. ábra. a) Példa kristálysíkokra kétdimenziós ferdeszögű rácsban. b) Kristálysíkok jellemzése a p, q és r indexekkel.

A kristálysíkokat az elemi rácsvektorok rögzítése mellett a következőképpen jellemezhetjük a $p, q, r \in \mathbb{N}$ számhármasokkal. A kristálytani tengelyeket rácspontokban metsző síkok közül kiválasztjuk az origóhoz legközelebb esőt és leolvassuk a metszéspontok helyét: $p\mathbf{a}_1$, $q\mathbf{a}_2$ és $r\mathbf{a}_3$.

Ha a teljes háromdimenziós térben az elemi rácsvektorokat tekintjük bázisvektoroknak, azaz a folytonos helyvektort $\mathbf{r} = x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + x_3\mathbf{a}_3$ alakban írjuk, ahol $x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}$, akkor a p, q, r számhármassal jellemzett sík egyenlete

$$\frac{x_1}{p} + \frac{x_2}{q} + \frac{x_3}{r} = \frac{n}{L},$$

ahol $n \in \mathbb{Z}$ a kristálysíkokat számlálja és L a p, q, r számok legkisebb közös többszöröse. Az origóban levő rácsponton keresztül haladó síkot az $n = 0$-dik, míg az origóhoz legközelebb eső síkok az $n = \pm 1$ sorszámúak. Adott p, q, r-hez végtelen sok kristálysík tartozik, melyeket n sorszámozza. Ezeket összefoglalóan kristálysíkseregnek nevezzük.

Egy kristálysíksereget a p, q, r helyett jellemezhetjük azzal a legkisebb $h, k, l \in \mathbb{N}$ egész számokból álló számhármassal, melyre

$$h : k : l = \frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r}$$

teljesül. Ezt a síksereg Miller-indexeinek nevezzük.

Egy h, k, l Miller-indexű sík normálisa a $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ reciprokrács-vektor, vagyis egy adott irányítottságú síksereget jellemezhetünk egy reciprokrács-vektorral. (Megjegyzés: különböző reciprokrács-vektorok akkor jellemeznek különböző síksereget, ha azok nem egymás skalárszorosai). Ennek bizonyításához tekintsük a 1.10. ábrán látható síkot, mely a kristálytani tengelyeket a $p\mathbf{a}_1$, $q\mathbf{a}_2$ és $r\mathbf{a}_3$ pontokban metszik. A kétdimenziós sík két bázisvektorának választhatjuk a $\mathbf{v}_1 = p\mathbf{a}_1 - q\mathbf{a}_2 = \frac{m}{h}\mathbf{a}_1 - \frac{m}{k}\mathbf{a}_2$ és $\mathbf{v}_2 = p\mathbf{a}_1 - r\mathbf{a}_3 = \frac{m}{h}\mathbf{a}_2 - \frac{m}{l}\mathbf{a}_3$ vektorokat. A sík bármely vektora ezen két vektor valamilyen lineáris kombinációjaként áll elő. Azt szeretnénk belátni, hogy a $\mathbf{G}_{hkl}$ vektor ennek a síknak a normálisa, vagyis

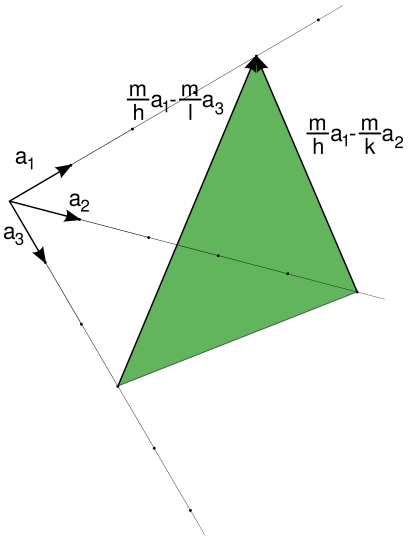
$$\mathbf{G}_{hkl}\mathbf{v}_1 = 0 \qquad \mathbf{G}_{hkl}\mathbf{v}_2 = 0$$

$$(h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3)\left(\frac{m}{h}\mathbf{a}_1 - \frac{m}{k}\mathbf{a}_2\right) = 0 \qquad (h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3)\left(\frac{m}{h}\mathbf{a}_2 - \frac{m}{l}\mathbf{a}_3\right) = 0,$$

ezek a $\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ definícióból adódóan teljesülnek, vagyis $\mathbf{G}_{hkl}$ valóban a h, k, l Miller-indexű síkok normálisa.

Két szomszédos, azonos irányítású kristálysík (m és $m+1$ sorszámú) az $\mathbf{a}_1$ által kijelölt kristálytani tengelyt az $\frac{m}{h}\mathbf{a}_1$ és az $\frac{m+1}{h}\mathbf{a}_1$ pontokban metszi. A különbség normális irányú vetülete épp a két sík közti távolságot adja meg

$$d_{hkl} = \frac{1}{h}\mathbf{a}_1\frac{\mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|}.$$



1.10. ábra.

Ennek az eredménynek a rugalmas szóráskísérletek szórási képének leírásában lesz szerepe.

A gyakorlaton bemutatásra kerül, hogy hogyan jellemezhetjük Miller-indexekkel a rácssíkokat köbös rácsban.

1.5. Házi feladatok

1. házi feladat

Szabályos háromszögrács esetén add meg az elemi rácsvektorokat, az általuk meghatározott elemi cellát és a Wigner-Seitz cellát! Add meg a reciprok rács elemi rácsvektorait és mondd meg, milyen rácsot határoznak meg! Számold ki a direkt rács és a reciprok rács Wigner-Seitz cellájának területét! Megoldásodat grafikusan is szemléltesd!

2. fejezet

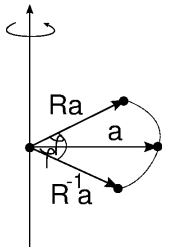
Kristályok forgatási és tükrözési szimmetriái

Egy kristály a diszkrét eltolásokon kívül más egybevágósági transzformációkra is invariáns lehet. Ilyen a forgatás, tükrözés, illetve ezek kombinációja, a forgatva tükrözés. Ezeknek a transzformációknak van fixpontjuk, ezért pontműveletnek nevezzük őket. A kristály legáltalánosabb szimmetriája egy pontművelet és egy eltolás kombinációja. A kristály összes szimmetriáját tartalmazó csoport a tércsoport. A tércsoport elemeiben megjelenű pontműveletek alkotják a pontcsoportot.

2.1. Kétdimenziós szimmetriaműveletek

Egy kétdimenziós rendszerben a jelenlevő eltolási szimmetria miatt nem lehetnek tetszőleges szögű forgatások a rács szimmetriái.

Tekintsük az R forgatást (φ szögű) és a hatását az $\mathbf{a}$ rácsvektoron. Ha R szimmetriája a rácsnak, akkor $R\mathbf{a}$ is rácsvektor és $R^{-1}\mathbf{a}$ is az. Az $R\mathbf{a} + R^{-1}\mathbf{a}$ vektor is rácsvektor és



2.1. ábra. Az $\mathbf{a}$ rácsvektor forgatása.

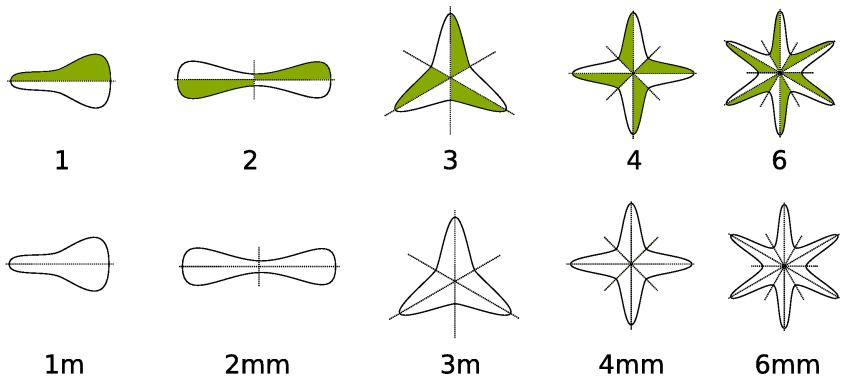
párhuzamos **a**-val, vagyis

$$R\mathbf{a} + R^{-1}\mathbf{a} = n\mathbf{a} \qquad n \in \mathbb{N} \quad \rightarrow \quad 2\cos\varphi = n$$

$$n = -2, -1, 0, 1, 2 \qquad \varphi = \pi, \frac{2\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}, 0 \quad ,$$

azaz csak $2\pi/l$ szögű forgatások lehetnek, ahol $l = 2, 3, 4, 6$ lehet. Ezeket két-, három-, négy- és hatfogású forgatásoknak nevezzük. Ezek definiálják a 4 kétdimenziós kristályrendszert: ferdeszögű, derékszögű (rombos), négyzetes (tetragonális), hatszöges. Kétdimenzióban egyedül a derékszögű rács lehet centrált, így a kristályrendszereknél eggyel több, 5 db kristályosztályt kapunk.

Két dimenzióban 10 különböző pontcsoport létezik. Az alábbiakban olyan síkidomokat ábrázoltunk, melyek szimmetriacsoportja éppen az ezen pontcsoportok valamelyike.



2.2. ábra. Kétdimenziós pontcsoportok illusztrációja.

A pontcsoportok közül nem mind lehet egy Bravais-rács pontcsoportja. A Bravais-rács olyan kristály, amelyben a bázis nem csökkenti a rács szimmetriáját. A rácsnak mindig szimmetriája az inverzió (ha **R** rácsvektor, akkor $-\mathbf{R}$ is az), így 1, 3, 1m és 3m nem lehetnek egy Bravais-rács pontcsoportja. Ezen kívül egy rácsban teljesülnie kell annak is, hogy ha van benne $n > 2$ fogású forgatási szimmetria, akkor létezik n különböző tükörsík is. Emiatt 4 és 6 sem lehetnek egy rács pontcsoportja. Így a kétdimenziós Bravais-rácsok lehetséges pontcsoportjai a következők:

2 2mm 4mm 6mm

A többi hat pontcsoport akkor lehet egy kristály pontcsoportja, ha a bázis csökkenti a rácsnak a szimmetriáját.
Egy háromdimenziós kristályban 32 különböző pontcsoport lehetséges, de ezek közül csak 7 lehet egy háromdimenziós Bravais-rács szimmetriája. A háromdimenziós kristályok részletes osztályozása megtalálható Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai I. 5.4.5. fejezetében.

(Irodalom: Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai I. 5.4. fejezet)

2.2. Neumann-elv

Egy kristály szimmetriájának nevezzük azt a térbeli transzformációt, amely a kristályt önmagába transzformálja. Az ilyen térbeli transzformációk csoportot alkotnak, melyet a kristály szimmetriacsoportjának nevezünk (és általában G-vel jelölünk).

Egy kristály szimmetriái megkötéseket adhatnak a kristály makroszkopikus fizikai tulajdonságait leíró tenzorok elemeire. Például ha a kristálynak a z koordinátatengely négyfogású forgástengelye, akkor a kristály „ugyanolyan" az x illetve y irányból nézve, így az x illetve y irányú elektromos vezetőképessége megegyezik. A végtelennek modellezett kristály transzlációs szimmetriái nem adnak kapcsolatot a különböző irányokban mért mennyiségek között, tehát ilyen szempontból a pontműveleteket (forgatások, tükrözések) tartalmazó pontcsoportból kell kiindulni. A fenti példán szemléltetett elv szabatos megfogalmazását Neumann-elvnek nevezzük. E szerint egy kristály valamilyen egyensúlyi makroszkopikus fizikai tulajdonságát leíró tenzor invariáns a kristály pontcsoportjának valamennyi transzformációjára.

A Neumann-elv szerint tehát ha egy kristálynak szimmetriacsoportja G, akkor a kristályt jellemző, mérhető vektor- vagy tenzormennyiségek (például mágnesezettség, elektromos polarizáció, vezetőképesség tenzor, dielektromos tenzor, stb.) is bírni fognak a rács szimmetriájával. Ez egy $\mathbf{v}$ vektormennyiség esetén az $\hat{R}\mathbf{v} = \mathbf{v}$, míg egy kétindexes, vektormennyiségeket összekötő $\hat{\sigma}$ tenzormennyiség esetén a $\hat{R}\,\hat{\sigma}\,\hat{R}^{-1} = \hat{\sigma}$ összefüggést jelenti minden $\hat{R} \in G$-re.

Ha térben homogén mennyiségeket vizsgálunk, akkor az eltolásokra vonatkozó feltétel triviálisan teljesül. Ebben az esetben már csak azt kell megvizsgálni, hogy a pontcsoport elemeire vonatkozó Neumann-elv milyen feltételt ad a tenzormennyiségre. Vizsgáljuk például a $\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E}$ egyenlettel definiált $\hat{\sigma}$ vezetőképesség-tenzort, ahol $\mathbf{j}$ az áramsűrűség és $\mathbf{E}$ az elektromos tér. Egy $\hat{R}$ ortogonális transzformáció hatására a $\mathbf{j}$ és $\mathbf{E}$ vektorok helyvektorként transzformálódnak:

$$\mathbf{j}' = \hat{R}\mathbf{j} \qquad\qquad \mathbf{E}' = \hat{R}\mathbf{E}$$

$$\mathbf{j}' = \hat{R}\,\mathbf{j} = \hat{R}\,\hat{\sigma}\,\mathbf{E} = \hat{R}\,\hat{\sigma}\,\hat{R}^{-1}\,\hat{R}\,\mathbf{E} = \hat{R}\,\hat{\sigma}\,\hat{R}^{-1}\,\mathbf{E}' \qquad \Rightarrow \qquad \hat{\sigma}' = \hat{R}\,\hat{\sigma}\,\hat{R}^{-1}.$$

A Neumann-elv azt a megkötést adja, hogy ha $\hat{R}$ szimmetriája a kristálynak, akkor

$$\hat{\sigma} = \hat{\sigma}' = \hat{R}\,\hat{\sigma}\,\hat{R}^{-1}.$$

A fizikában vektormennyiségeken, vagy poláris vektorokon (pl.: helyvektor, sebesség, térerősség, polarizáció) kívül axiális vektorokkal is találkozhatunk (pl.: mágneses tér, impulzusmomentum, mágneses dipólus), melyek másképpen transzformálódnak térbeli transzformációk hatására. Például inverzió hatására az az axiális vektorok a poláris vektorokkal szemben nem -1-gyel, hanem $+1$-gyel szorzódnak. Azok a tenzormennyiségek is másképpen transzformálódnak, melyek nem csak vektormennyiségeket kötnek össze (pl.: vezetőképesség), hanem például egy axiális és egy poláris vektort. A példa feladatokban az axiális vektorokkal részletesebben is foglalkozunk.

2.3. Példa feladatok Neumann-elv alkalmazására

2.3.1. Háromfogású forgatás két dimenzióban

Ha egy kétdimenziós kristálynak szimmetriája a

$$C_3 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{3} & -\sin\frac{2\pi}{3} \\ \sin\frac{2\pi}{3} & \cos\frac{2\pi}{3} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \qquad C_3^{-1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

háromfogású forgatás, akkor a vezetőképesség tenzorra $\hat{\sigma} = C_3\hat{\sigma}C_3^{-1}$ teljesül.

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \sigma_{xx}+3\sigma_{yy}+\sqrt{3}(\sigma_{xy}+\sigma_{yx}) & -\sqrt{3}(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})+\sigma_{xy}-3\sigma_{yx} \\ -\sqrt{3}(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})-3\sigma_{xy}+\sigma_{yx} & 3\sigma_{xx}+\sigma_{yy}-\sqrt{3}(\sigma_{xy}+\sigma_{yx}) \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

Az (2.1) egyenlet négy összefüggést jelent a mátrixelemek között, melyek alapján

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \qquad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx},$$

vagyis a független elemek száma a vezetőképesség tenzorban 2-re csökken egy háromfogású szimmetriával rendelkező rendszerben. Megjegyezzük, hogy az (2.1) képlet négy egyenlete nem független, ezért nem határozzák meg egyértelműen a mátrixelemeket.

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}$$

2.3.2. Tükrözés két dimenzióban

Mátrixszorzás helyett tükrözéseknél, két-, és négy fogású forgatásoknál kihasználhatjuk, hogy a tenzorelemek úgy transzformálódnak, mint helyvektorok megfelelő koordinátáinak szorzata. Például egy kétdimenziós rendszerben az y-tengelyre való tükrözés a helyvektorok koordinátáit

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} -x \\ y \end{pmatrix}$$

szerint transzformálja. Ekkor a vezetőképesség tenzor

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$$

szerint transzformálódik. Ha rendszernek szimmetriája ez a tükrözés, akkor a Neumann-elv alapján ez a két mátrix egyenlő egymással, vagyis $\sigma_{yx} = \sigma_{xy} = 0$ és

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$$

diagonális lesz a vezetőképesség. A módszer nem alkalmazható három- vagy hatfogású forgatási szimmetria esetén.

Általánosságban elmondhatjuk, hogy ha a kristálynak van valamilyen szimmetriája, akkor az megszorítást adhat egy tenzormennyiség elemei között. Megjegyezzük, hogy az inverziós szimmetria egy kétindexes tenzormennyiség elemei között semmilyen összefüggést nem ad, mert az inverziót a $-\hat{I}$ mátrix reprezentálja a valós térben ($\hat{I}$ az egységmátrix), amely bármelyik mátrixszal felcserélhető. Ez bármilyen páros indexszámú tenzormennyiség esetén teljesül, azonban páratlan indexszámú tenzoroknál már nem feltétlenül igaz és az inverzió is adhat megszorítást a tenzor elemei között.

2.3.3. Négyfogású forgatási szimmetria három dimenzióban

Tekintsünk egy háromdimenziós kristályt, melynek szimmetriája a z-tengely körüli 90 fokos forgatás (C_4^z). Ezen forgatás alatt a helyvektor

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} y \\ -x \\ z \end{pmatrix}$$

szerint transzformálódik, a vezetőképesség tenzor pedig

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{yx} & \sigma_{yz} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & -\sigma_{xz} \\ \sigma_{zy} & -\sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

szerint. Ezzel a tenzor

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

alakban írható, vagyis független elemeinek száma 3.

Ha a rendszert jellemez egy xz síkra való tükrözés is, mely alatt a helyvektorok

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$

szerint transzformálódnak, akkor a Neumann-elv alapján $\sigma_{xy} = 0$. Ha egy ilyen rendszerre mágneses teret kapcsolunk, akkor ez a tükrözési szimmetria elveszik és megjelennek a vezetőképességben a nem diagonális elemek (Hall-vezetőképesség).

Ha a rendszert még egy y tengely körüli derékszögű forgatás is jellemez, akkor $\hat{\sigma} = \sigma\hat{I}$ diagonális, sőt az egységmátrix skalárszorosa, vagyis egyetlen független eleme van a tenzornak.

2.3.4. Négyindexes tenzorok szimmetriái (Hooke-tenzor)

Egy anyagban a feszültségtenzor ($\sigma_{\alpha\beta}$) és a deformáció tenzor ($\varepsilon_{\gamma\delta}$) közti összefüggést a Hooke-tenzor segítségével adhatjuk meg.

$$\sigma_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta\gamma\delta}\varepsilon_{\gamma\delta}$$

A közeg rugalmas energiája

$$U = \frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta}H_{\alpha\beta\gamma\delta}\varepsilon_{\gamma\delta}$$

szerint írható. A Hooke-tenzor elemei nem függetlenek a Young-tétel és megmaradási törvények miatt.

$$H_{\alpha\beta\gamma\delta} = H_{\beta\alpha\gamma\delta} = H_{\alpha\beta\delta\gamma} = H_{\gamma\delta\alpha\beta} \tag{2.2}$$

Ez alapján 21 független eleme lehet a tenzornak. Ha a rendszer izotróp, akkor a független mátrixelemek száma 2-re csökken. A továbbiakban azt szeretnénk meghatározni, hogy hány független eleme van a Hooke-tenzornak köbös szimmetria esetén. A két- és négyfogású forgatások alatt a helyvektorok

$$C_4^z: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} y \\ -x \\ z \end{pmatrix} \qquad C_4^y: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -z \\ y \\ x \end{pmatrix}$$

$$C_4^x: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ z \\ -y \end{pmatrix} \qquad C_2^x: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$

szerint transzformálódnak. így a tenzor elemeire az alábbi összefüggéseket kapjuk (a számolásoknál $*$ jelzi, ha használtuk a (2.2) egyenleteket).

$$
\begin{cases}
H_{xxxx} \xrightarrow{C_4^z} H_{yyyy} \\
H_{yyyy} \xrightarrow{C_4^x} H_{zzzz}
\end{cases}
\Rightarrow \qquad H_{\alpha\alpha\alpha\alpha} = \boxed{H_{11}}
$$

$$
\begin{cases}
H_{xxxy} \xrightarrow{C_2^x} -H_{xxxy} \\
\vdots
\end{cases}
\Rightarrow \quad H_{\alpha\alpha\alpha\beta} = H_{\alpha\alpha\beta\alpha} = H_{\alpha\beta\alpha\alpha} = H_{\beta\alpha\alpha\alpha} = 0 \quad \alpha \neq \beta
$$

$$
\begin{cases}
H_{xxyy} \xrightarrow{C_4^z} H_{yyxx} \\
H_{xxyy} \xrightarrow{C_4^y} H_{zzyy} \\
H_{xxyy} \xrightarrow{C_4^x} H_{xxzz} \\
\vdots
\end{cases}
\Rightarrow \qquad H_{\alpha\alpha\beta\beta} = \boxed{H_{12}} \quad \alpha \neq \beta
$$

$$
\begin{cases}
H_{xyzz} \xrightarrow{C_4^z} -H_{yxzz} \\
H_{xyzz} \xrightarrow{C_4^y} -H_{zyxx} \\
H_{xyxz} \xrightarrow{C_4^x} -H_{xzxy} \\
\vdots
\end{cases}
\Rightarrow \quad H_{\alpha\beta\gamma\gamma} = H_{\gamma\gamma\alpha\beta} = H_{\alpha\beta\alpha\gamma} = 0 \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha \quad *
$$

$$
\begin{cases}
H_{xyxy} \xrightarrow{C_4^z} H_{yxyx} \\
\vdots
\end{cases}
\Rightarrow \quad H_{\alpha\beta\alpha\beta} = H_{\beta\alpha\beta\alpha} = H_{\alpha\beta\beta\alpha} = \boxed{H_{44}} \quad \alpha \neq \beta \quad *
$$

A szimmetria megfontolások során láthattuk, hogy a Hooke-tenzornak egy köbös szimmetriájú rendszerben 3 független eleme lesz: H_{11}, H_{12} és H_{44}. A rugalmas energia ezekkel kifejezve

$$
U = \frac{1}{2} H_{11} \left(\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{zz}^2 \right) + H_{12} \left(\varepsilon_{xx}\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{yy}\varepsilon_{zz} \right) + 2H_{44} \left(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2 \right).
$$

Megjegyezzük, hogy a tükrözések nem csökkentik tovább a független elemek számát. Arra is érdemes felfigyelni, hogy míg a kétindexes tenzoroknak köbös szimmetria esetén is és izotróp rendszerben is csak egy független eleme van, addig egy négyindexes tenzor esetén már a két szimmetriacsoport megkülönböztethető.

2.3.5. Ferroelektromosság és ferromágnesség megjelenésének szimmetria feltételei

Egy háromdimenziós kristály pontcsoportja

a) az inverziós csoport (csak inverziós szimmetriát tartalmaz),

b) a C_n csoport (n-fogású forgási szimmetria),

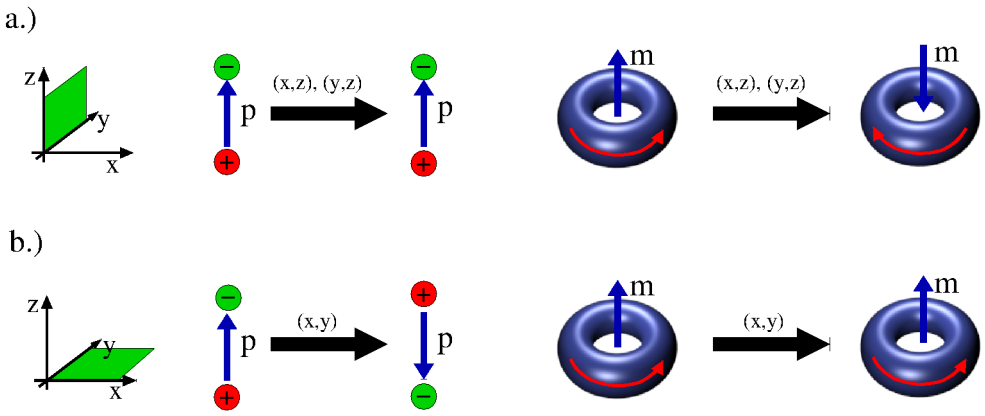
c) a C_{nv} csoport (n-fogású szimmetria és a forgástengelyt tartalmazó tükrözések),

d) a C_{nh} csoport (n-fogású szimmetria és a forgástengelyre merőleges tükrözés),

e) a köbös csoport (a szabályos kocka szimmetriacsoportja).

Mely esetben lehet a kristály ferroelektromos vagy ferromágneses (azaz ilyen szimmetriával rendelkező kristálynak lehet-e **p** elektromos polarizációja illetve **m** mágnesezettsége)?

Emlékeztető: Poláris és axiális vektorok.



2.3. ábra. A **p** elektromos polarizáció vektor és az **m** mágneses momentum transzformációja *a.*) a vektort tartalmazó síkra, *b.*) a vektorra merőleges síkra való tükrözés hatására.

Fizikában számos mennyiség (például erő, gyorsulás, sebesség, elektromos térerősség stb.) térbeli forgatásokra és tükrözésekre is úgy transzformálódik, mint egy vektor. Ezek a vektoriális mennyiségek, avagy poláris vektorok. Más mennyiségek (például mágneses tér, mágnesezettség, impulzusmomentum) viszont, bár forgatásokra ugyanúgy transzformálódnak, mint a poláris vektorok, tükrözésekre és inverzióra éppen ellentétesen viselkednek. Ha tértükrözést hajtunk végre például a **B** mágneses tér irányára merőlegesen, akkor az nem változtatja meg **B** irányát. Míg ha a **B**-t tartalmazó síkra tükrözünk, **B** megfordul. Axiális vektor még például egy sík irányítás szerinti normálvektora és egy vektormező rotációja is. Például az **A** vektorpotenciál rotációja, a $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$ mágneses indukció vektor is axiális vektor.

A **p** elektromos polarizáció vektor poláris vektor, míg az **m** mágnesezettség axiális vektor. Ennek okát segít megérteni, ha **p**-re úgy gondolunk, hogy azt térben rögzített elektromos töltések hozzák létre, míg **m**-re parányi gyűrűkben folyó köráramok által keltett mágneses momentumok összegeként gondolunk (2.3. ábra). Mutasson **p** és **m** a z-tengely irányába. Hogyha egy a z-tengelyt tartalmazó síkra tükrözünk (2.3a. ábra), akkor az őt létrehozó dipólus, és ezért **p** is változatlan marad. Az **m**-et keltő gyűrűben

viszont az áram iránya megfordul, így $\mathbf{m}$ is (-1)-szeresére változik. Ha viszont a z-tengelyre merőlegesen tükrözünk, akkor a dipól, és vele együtt $\mathbf{p}$ fordul meg, a gyűrűben folyó áram pedig változatlan marad, így az $\mathbf{m}$ mágnesezettség sem változik.

Megoldás:
A Neumann-elv szerint egy kristály makroszkopikus, mérhető mennyiségeinek invariánsaknak kell lenniük a kristály szimmetriatranszformációira. Ezért például ha egy kristálynak adott forgástengely körüli forgási szimmetriája van, $\mathbf{p}$ és $\mathbf{m}$ párhuzamos kell legyen a forgástengellyel. Hasonlóan, mivel $\mathbf{p}$ poláris vektor, $\mathbf{m}$ pedig axiális vektor, ha egy síkra való tükrözés a kristály pontcsoport-szimmetriája, $\mathbf{p}$-nek benne kell lennie a síkban, $\mathbf{m}$ pedig merőleges kell hogy legyen rá.

Ezek alapján könnyen válaszolhatunk a feladat kérdéseire.

a) $\mathbf{p} = 0$. Az inverziós szimmetria viszont nem ad megszorítást a mágnesezettségre, ugyanis egy inverzió előállítható három merőleges tükörsíkra való tükrözés egymásutánjaként, ezek pedig összességében invariánsan hagyják az axiális vektorokat.

b) $\mathbf{p}$ és $\mathbf{m}$ a forgástengely irányába mutathat.

c) $\mathbf{p}$ a forgástengely irányába mutathat, $\mathbf{m} = 0$.

d) $\mathbf{m}$ a forgástengely irányába mutathat, $\mathbf{p} = 0$.

e) Mivel a köbös csoportban több különböző tengely körüli forgási szimmetria is van, $\mathbf{p} = \mathbf{m} = 0$ kell legyen, hiszen $\mathbf{p}$-nek és $\mathbf{m}$-nek egyszerre több különböző tengellyel is párhuzamosnak kellene lennie.

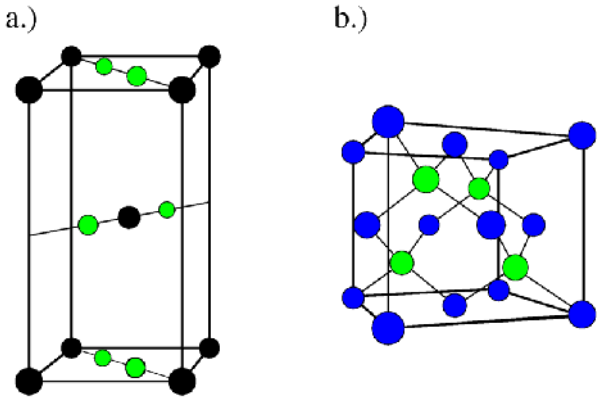
2.3.6. Ferroelektromosság és ferromágnesség kristályokban

A 2.4. ábrán látható kristályrácsok közül melyik lehet ferroelektromos illetve ferromágneses?

a) A rutil (TiO_2) kristályrácsa. Ti: fekete atomok, O: zöld atomok.

b) Gyémántrács: két egymáshoz képest 1/4 testátlóval eltolt lapcentrált köbös rácsból áll. A különböző színek a két alrács szénatomjait jelölik.

Milyen irányba mutathat a $\mathbf{p}$ elektromos polarizáció és az $\mathbf{m}$ mágnesezettség?
Megoldás:
Bár a rutil és a gyémánt kristályrácsa bonyolult, a feladatot egyszerű megoldani a rácsok magas szimmetriája miatt. A rutil három merőleges síkra vett tükrözési szimmetriával, a gyémánt pedig a testátlói körüli háromfogású szimmetriával rendelkezik. Ezek a szimmetriák pedig kizárják mind a ferroelektromosságot, mind a ferromágnesességet (ld. az előző feldata megoldását).



2.4. ábra. Kristályrácsok.

2.3.7. Köbös rács deformációja

Tekintsünk egy egyszerű köbös kristályt, amelyet összenyomunk az [111] Miller indexekkel jellemzett irány, vagyis a kocka egyik testátlója mentén. Milyen szimmetriaműveletek alkotják az így deformált kristály pontcsoportját? Hány független eleme lesz ekkor a kristályt jellemző kétindexes, homogén ($\mathbf{q} = 0$) tenzormennyiségeknek?

Megoldás:
Az összenyomás során megmaradó szimmetriáknak invariansan kell hagynia az [111] irányt, így a kockarács legtöbb szimmetriája elvész. A kristály [111] tengelyre merőleges síkban, és az azzal párhuzamos egyenes mentén megőrzi a szimmetriáit. Így a megmaradt szimmetriák az inverzió, [111] tengely körüli háromfogású forgatási szimmetria (C_{3v}) és három, az [111] tengelyt tartalmazó síkra vett tükrözés.

Korábban beláttuk, hogy egy tengely körüli háromfogású forgatási és további tükrözési szimmetriák esetén a kétindexes homogén tenzorok a tengelyt tartalmazó koordinátabázisban diagonálisak lesznek, összesen két független elemmel. Ezért ha egy $\mathbf{O}$ ortogonális transzformációval áttérünk egy az [111] irányt tartalmazó bázisra, akkor egy tetszőleges $\mathbf{S}$ két indexes homogén tenzor a következő alakú lesz

$$\mathbf{S}' = \mathbf{O}^T \mathbf{S}\, \mathbf{O} = \begin{pmatrix} S_{x'x'} & 0 & 0 \\ 0 & S_{y'y'} & 0 \\ 0 & 0 & S_{y'y'} \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{O}$-t megválaszthatjuk a következőféleképpen

$$\mathbf{O} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}}. \end{pmatrix}$$

Visszatérve az eredeti koordinátarendszerre, és bevezetve az $S_1 = \frac{S_{x'x'}+2S_{y'y'}}{3}$ és $S_2 = \frac{S_{x'x'}-S_{y'y'}}{3}$ változókat, megkapjuk a kétindexes tenzorokra vonatkozó képletet,

$$\mathbf{S} = \mathbf{O}\,\mathbf{S}'\,\mathbf{O}^T = \begin{pmatrix} S_1 & S_2 & S_2 \\ S_2 & S_1 & S_2 \\ S_2 & S_2 & S_1 \end{pmatrix}.$$

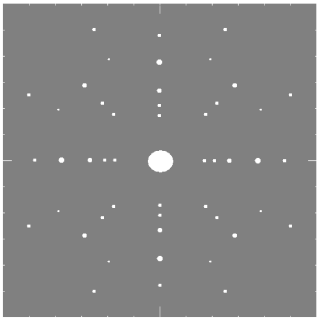
2.4. Házi feladatok

2. házi feladat

Tekintsünk egy tetragonális rácsot, ahol $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_3$ és $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| \neq |\mathbf{a}_3|$. A rács bázisa legyen egyatomos. A Neumann-elv segítségével és a kristály szimmetriáinak ismeretében határozzuk meg, hogy hány független eleme van a vezetőképesség tenzornak!

3. házi feladat

Az ábrán egy egyatomos bázisú kristály Laue szórási képét látjuk. Ezen kívül tudjuk, hogy van még két merőleges irány, melyből felvéve a szórási kép ezzel megegyezik. Ezen szimmetriák alapján add meg milyen rácsról van szó! Sorold föl a kristály összes térbeli szimmetriáját! A Neumann-elv segítségével mutasd meg, hogy a dielektromos tenzor az egységtenzor skalárszorosa!



2.5. ábra. Laue szórási kép

4. házi feladat

Soroljuk be a 10 kétdimenziós pontcsoportot az 5 kristályosztályba!

3. fejezet

Rugalmas szórás kísérletek

Kristályos anyagok szerkezetének vizsgálatára gyakran szóráskísérleteket használunk, ahol az anyagra érkező hullám vagy részecskenyaláb eltérülése miatt fellépő térbeli mintázatot, az ún. szórási képet elemezzük. Rugalmas szóráskísérletek szórási amplitúdóját, azaz a bejövőhöz képest $\Delta\mathbf{k}$ hullámszámmal eltérült hullám amplitúdóját

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{n\alpha} \left(\int \mathrm{d}V \, \rho_\alpha(\mathbf{r}) e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{r}} \right) e^{i\Delta\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_\alpha} e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{R}_n}$$

szerint írhatjuk fel, ahol $\mathbf{R}_n$ a rácshelyeket jelöli, $\boldsymbol{\tau}_\alpha$ pedig az egy elemi cellában megtalálható atomok cellán belüli helyzetét meghatározó helyvektor. Attól függően, hogy milyen részecskék szóródását tekintjük, mást kell írni ρ_α helyébe. Röntgenszórás esetén például ρ_α az α atomon az elektronok töltéssűrűsége. Az atomi szórási tényezőt

$$f_\alpha(\Delta\mathbf{k}) = \int \mathrm{d}V \, \rho_\alpha(\mathbf{r}) e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

szerint definiáljuk. Ez az egyedülálló α típusú atomok szórását jellemzi. Hasonlóan az

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\tau}_\alpha} f_\alpha(\Delta\mathbf{k}) e^{i\Delta\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_\alpha}$$

szerkezeti tényező (struktúra faktor) egy egész elemi cella szórását jellemzi. A rácsösszeget

$$\sigma(\Delta\mathbf{k}) = \sum_n e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{R}_n}$$

szerint definiáljuk, így a szórási amplitúdó

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \sigma(\Delta\mathbf{k}) S(\Delta\mathbf{k})$$

alakban írható. A $\Delta\mathbf{k}$-val szóródó részecskenyaláb intenzitása $I(\Delta\mathbf{k}) = |A(\Delta\mathbf{k})|^2$.

3.1. Rácsösszeg

Egy véges méretű mintában az $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3$ rácsvektorokra $n_1 \in \{-N_1, -N_1+1, \ldots, N_1\}$, $n_2 \in \{-N_2, -N_2+1, \ldots, N_2\}$ és $n_3 \in \{-N_3, -N_3+1, \ldots, N_3\}$. Az összes rácshelyek száma $N = (2N_1+1)(2N_2+1)(2N_3+1)$. A $\Delta\mathbf{k} = \Delta k_1\mathbf{b}_1 + \Delta k_2\mathbf{b}_2 + \Delta k_3\mathbf{b}_3$ hullámszámvektornál a rácsösszeg értéke

$$\frac{1}{N}\sigma(\Delta\mathbf{k}) = \frac{1}{2N_1+1}\frac{1}{2N_2+1}\frac{1}{2N_3+1}\sum_{n_1=-N_1}^{N_1}\sum_{n_2=-N_2}^{N_2}\sum_{n_3=-N_3}^{N_3} e^{2\pi i\sum_{j=1}^{3}\Delta k_j n_j} =$$

$$= \prod_{j=1}^{3}\left(\frac{1}{2N_j+1}\sum_{n_j=-N_j}^{N_j} e^{2\pi i\Delta k_j n_j}\right) = \prod_{j=1}^{3}\left(\frac{e^{-2\pi i\Delta k_j N_j}}{2N_j+1}\sum_{n_j=0}^{2N_j} e^{2\pi i\Delta k_j n_j}\right)$$

lesz, ahol az összegzésben valójában egy mértani sorösszeg szerepel, vagyis

$$\frac{1}{N}\sigma(\Delta\mathbf{k}) = \prod_{j=1}^{3}\left(\frac{e^{-2\pi i\Delta k_j N_j}}{2N_j+1}\frac{1-e^{2\pi i\Delta k_j(2N_j+1)}}{1-e^{2\pi i\Delta k_j}}\right) = \prod_{j=1}^{3}\frac{\sin\left(\pi\Delta k_j(2N_j+1)\right)}{(2N_j+1)\sin\left(\pi\Delta k_j\right)}.$$

Termodinamikai határesetben, azaz $N_j \to \infty$ esetben

$$\frac{\sin\left(\pi\Delta k_j(2N_j+1)\right)}{(2N_j+1)\sin\left(\pi\Delta k_j\right)} \to \begin{cases} 1 & \text{ha } \Delta k_j \in \mathbb{Z} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}.$$

Az, hogy Δk_j egész szám, éppen azt jelenti, hogy $\Delta\mathbf{k}$ egy reciprokrács-vektor, vagyis

$$\sigma(\Delta\mathbf{k}) = N\sum_{\mathbf{G}}\delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}$$

a rácsösszeg alakja termodinamikai határesetben. Látható, hogy a rácsösszeg ebben a formában nagyon erős megszorítást ad azokra a $\Delta\mathbf{k}$ hullámszámokra, mellyel a szóródó részecske eltérülhet. A szórási képben ez alapján csak az ún. Bragg-csúcsok jelenhetnek meg a reciprokrács-vektoroknak megfelelő pontokban. Más irányokban nem lehet szórt intenzitás, mert a különböző rácshelyeken szóródó hullámok destruktívan interferálnak.

3.2. Atomi szórási tényező

Tekintsünk egy gömbszimmetrikus eloszlású $\rho(\mathbf{r}) = \rho(r)$ töltéssűrűséget. Az atomi szórási tényező ekkor

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \int \mathrm{d}V\,\rho(r)e^{i\Delta\mathbf{kr}} = \int_0^\infty \mathrm{d}r\,r^2\int_0^\pi \mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\,\rho(r)e^{i\Delta kr\cos\vartheta} =$$

$$= 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}r r^2 \rho(r) \int_{-1}^1 \mathrm{d}x\, e^{i\Delta k r x} = \frac{4\pi}{\Delta k} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r\rho(r) \sin(\Delta k r)$$

alakban írható. Ahhoz, hogy tovább tudjunk számolni, tudnunk kellene $\rho(r)$ pontos alakját.

3.2.1. Atomi szórási tényező 1s pályák esetén

Az $1s$ pálya hullámfüggvénye

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_\mathrm{B}^3}} e^{-\frac{r}{a_\mathrm{B}}}$$

alapján a töltéssűrűség

$$\rho(r) = q|\Psi(r)|^2 = \frac{q}{\pi a_\mathrm{B}^3} e^{-\frac{2r}{a_\mathrm{B}}},$$

ahol q az elektron töltése és a_B a Bohr-sugár. Az atomi szórási tényező

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \frac{4q}{\Delta k a_\mathrm{B}^3} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r\, e^{-\frac{2r}{a_\mathrm{B}}} \sin(\Delta k\, r) = \frac{q}{\Delta k a_\mathrm{B}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\, y\, e^{-y} \sin\left(\frac{\Delta k a_\mathrm{B}}{2} y\right).$$

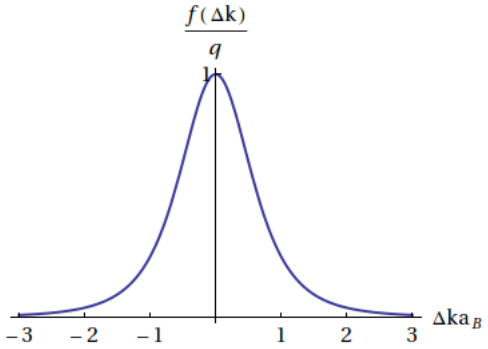
Ismert az

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x\, e^{-x} \sin(bx) = \frac{2b}{(1+b^2)^2}$$

összefüggés, így

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \frac{q}{\left[1 + \left(\frac{\Delta k\, a_\mathrm{B}}{2}\right)^2\right]^2}$$

adódik, melyet a 3.1. ábrán ábrázoltunk.



3.1. ábra. Az atomi szórási tényező a hullámszám függvényében.

Az atomi szórási tényező csak a $|\Delta\mathbf{k}| \lesssim 2a_\mathrm{B}^{-1}$ hullámszámokra enged meg konstruktív interferenciát a szórási képben. A nagyobb abszolút értékű szórásvektorokhoz tartozó Bragg-csúcsok intenzitását az atomi szórási tényező elnyomja.

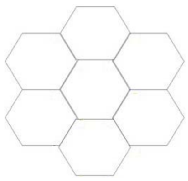
3.3. Szerkezeti tényező

Ha egy kristály elemi cellája több atomot tartalmaz, akkor a teljes elemi cellát az

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\tau}_\alpha} f_\alpha(\Delta\mathbf{k}) e^{i\Delta\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_\alpha}$$

struktúra faktor jellemzi, ahol f_α az α típusú atom atomi szórási tényezője. Vegyük észre, hogy a szerkezeti tényező fenti alakja, miszerint az az atomi szórási tényezők fázishelyes összege, csupán közelítés. A kristályban ugyanis az egyes atomok kötéseket létesítenek, így a kristályban a töltéssűrűség térbeli mintázata nem pusztán a független atomok töltéssűrűségének összege. A korábbiakban láttuk, hogy a rácsösszeg miatt csak a reciprokrács-vektoroknál lehet erősítés az interferencia képben, vagyis ha $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$, ahol $\mathbf{G}$ reciprokrács-vektor. Kiderül azonban, hogy többatomos elemi cella esetén a struktúra faktor modulálja a szórási képet, sőt, az is előfordulhat, hogy valamely reciprokrács-vektornál kioltást eredményez.

3.3.1. Szerkezeti tényező grafénrácsban



A grafént kétdimenziós hatszögráccsal modellezhetjük (méhsejtrács). Ennek a rácsnak az elemi cellája két atomot tartalmaz, melyek helyzetét a cellában a

$$\boldsymbol{\tau}_A = 0 \qquad \boldsymbol{\tau}_B = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{3}$$

vektorok jellemzik. A két atom atomi szórási tényezője atomnak azonos, mert mindkettő ugyanolyan szén atom. Így a szerkezeti tényező

$$S(\mathbf{G}_{hk}) = f\left(1 + e^{2\pi i \frac{h+k}{3}}\right)$$

szerint modulálja a szórási képet. Kioltást, vagyis ahol $S(\mathbf{G}_{hk})$ zérus lenne, semmilyen h, k számpárra nem találhatunk.

A bór-nitrid kristályszerkezete a grafénével azonos azzal a különbséggel, hogy az A típusú atomok helyén bór, a B típusúak helyén nitrogén atomok helyezkednek el. A különböző atomok szórási tényezője is eltérő. A szerkezeti tényező

$$S(\mathbf{G}_{hk}) = f_A + f_B\, e^{2\pi i \frac{h+k}{3}}. \tag{3.1}$$

Így az egyes csúcsok intenzitásai

$$|S(\mathbf{G}_{hk})|^2 = \begin{cases} (f_A + f_B)^2, & \text{ha } h+k \text{ osztható 3-mal,} \\ f_A^2 + f_B^2 - f_A f_B & \text{egyébként.} \end{cases} \tag{3.2}$$

Kioltás tehát akkor lehetséges, ha $f_A = -f_B$ teljesül az atomi szórási tényezőkre. Ebben az esetben azoknál a reciprokrács-vektoroknál találnánk kioltást, melyekre $h+k$ osztható 3-mal.

3.4. Porminta szórási képe

Egy rácsban a kristálysíkok távolsága

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|}$$

szerint írható, ahol h, k, l a síksereg Miller-indexei és $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ a síkok normálisával párhuzamos legrövidebb reciprokrács-vektor. Szórási kísérletben a Bragg-feltétel alapján akkor van erősítés, ha

$$\sin^2\vartheta = \frac{\lambda^2}{4d_{hkl}^2} = \frac{\lambda^2}{16\pi^2}|\mathbf{G}_{hkl}|^2$$

teljesül a szóródó részecskék útjának 2ϑ szöggel történő törésével. Megjegyezzük, hogy a következő számolások csak pormintán végzett kísérletek esetén adnak hasznos eredményt. Ekkor ugyanis az elrendezés a beeső nyaláb körül folytonos forgásszimmetriával bír és a szórási kép koncentrikus körökből áll (Bragg csúcsok helyett). Ezen köröket egyértelműen jellemzi a ϑ szög.

A következő néhány példa alapján azt vizsgáljuk meg, hogy adott kristályszerkezet esetén milyen szekvencia szerint követhetik egymást ezek a körök.

3.4.1. Köbös rács szórási képe

Egy a rácsállandójú köbös rácsban

$$|\mathbf{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

a reciprokrács-vektorok hossza, vagyis erősítés a szórási kísérletben csak olyan szögeknél van, melyre

$$\sin^2\vartheta = \frac{\lambda^2}{4a^2}\left(h^2+k^2+l^2\right) = \frac{\lambda^2}{4a^2}N$$

teljesül. Ha h, k, l egész számokon fut végig, akkor N csak a következő értékek valamelyikét veheti fel.

$$N = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad \bullet \quad 8 \quad 9 \quad 10 \quad 11 \quad 12 \quad 13 \quad 14 \quad \bullet \quad 16 \quad \ldots$$

3.4.2. Lapcentrált köbös rács szórási képe

Egy lapcentrált köbös rácsban az elemi reciprokrács-vektorok

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\,(\,1 \quad 1 \quad -1\,)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\,(\,1 \quad -1 \quad 1\,)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\,(\,-1 \quad 1 \quad 1\,)$$

szerint írhatók, melyekkel egy tetszőleges reciprokrács-vektor

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\big(h+k-l\,,\,h-k+l\,,\,-h+k+l\big)$$

$$|\mathbf{G}_{hkl}|^2 = \frac{4\pi^2}{a^2}\left[3\left(h^2+k^2+l^2\right) - 2\,(hk+kl+lh)\right]$$

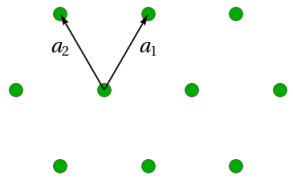
lesz. A szórási képben erősítések lesznek, ha

$$\sin^2\vartheta = \frac{\lambda^2}{4a^2}\left[3\left(h^2+k^2+l^2\right) - 2\,(hk+kl+lh)\right] = \frac{\lambda^2}{4a^2}N$$

teljesül. Tetszőleges számhármasok esetén az alábbi N értékek adódnak.

$$N = 0 \quad \bullet \quad \bullet \quad 3 \quad 4 \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad 8 \quad \bullet \quad \bullet \quad 11 \quad 12 \quad \ldots$$

3.4.3. Kétdimenziós háromszögrács



3.2. ábra. Kétdimenziós háromszögrács elemi rácsvektorai. A rácsállandó a.

Egy kétdimenziós háromszögrácsban (3.2. ábra) az elemi rácsvektorok alapján

$$\mathbf{A} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \sqrt{3} & \sqrt{3} \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{B} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\begin{pmatrix} \sqrt{3} & 1 \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}$$

és egy tetszőleges reciprokrács-vektor hossza

$$|\mathbf{G}_{hk}| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\sqrt{h^2+k^2-hk}.$$

A szórási képben olyan ϑ szögeknél lesz erősítés, melyekre

$$\sin^2\vartheta = \frac{\lambda^2}{3a^2}\left(h^2+k^2-hk\right) = \frac{\lambda^2}{3a^2}N,$$

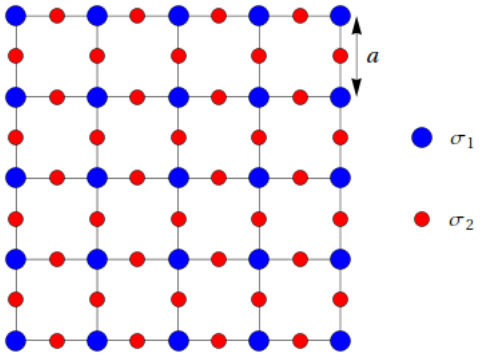
ahol N lehetséges értékei

$$N = 0 \quad 1 \quad \bullet \quad 3 \quad 4 \quad \bullet \quad \bullet \quad 7 \quad \bullet \quad 9 \quad \bullet \quad \bullet \quad 12 \quad \ldots$$

3.5. Példa feladatok rugalmas szóráskísérletekre

3.5.1. Réz-oxid sík szórási képe

Tekintsük az alábbi ábrán látható CuO_2 síkot!



3.3. ábra. Réz-oxid sík.

a) Az atomokat r_0 sugarú, $\sigma_1 > 0$ illetve $\sigma_2 < 0$ felületi töltésű gömbhéjjal modellezzük. Adjuk meg a kétféle atom atomi szórási tényezőjét.

b) Határozzuk meg az elemi cellát és a reciprok rácsot!

c) Számoljuk ki az elemi cellát jellemző szerkezeti tényezőt!

d) Milyen $\mathbf{\Delta k}$ szórásvektorokra kapunk intenzitás-maximumokat és minimumokat?

e) Mekkora az atomi szórási tényező, ha az atomokat r_0 sugarú $\rho(r) = r/(\pi r_0^4)$ töltéssűrűségű gömböknek tekintjük?

Megoldás:
a) Az atomi szórási tényező definíciója alapján

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \int dV e^{i\Delta\mathbf{kr}}\rho(\mathbf{r}),$$

ahol $\rho(\mathbf{r}) = \sigma_1\delta(r - r_0)$. Ezzel

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \frac{4\pi\sigma_1 r_0}{\Delta k}\sin\Delta k r_0$$

a σ_1 felületi töltéssűrűségű atomok atomi szórási tényezője. Az σ_2 esetben csak annyi a különbség, hogy a formulában σ_1-t kicseréljük σ_2-re. Jól látható, hogy az atomi szórási tényező nagy hullámszámokra eltűnik.
b) Az elemi cella három atomot tartalmaz és az elemi rácsvektorok

$$\mathbf{a}_1 = a\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = a\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

ahol a két szomszédos Cu atom távolságát jelöli. Az elemi reciprokrács-vektorok így

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

c) A szerkezeti tényező az elemi cellát jellemzi. Egy cellán belül az atomok helyzetét a

$$\boldsymbol{\tau}_1 = 0 \qquad \boldsymbol{\tau}_{2x} = \frac{\mathbf{a}_1}{2} \qquad \boldsymbol{\tau}_{2y} = \frac{\mathbf{a}_2}{2}$$

vektorok határozzák meg.

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\tau}} e^{i\Delta\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}} f_{\boldsymbol{\tau}}(\Delta\mathbf{k}) = \frac{4\pi r_0}{\Delta k}\sin(\Delta k r_0)\left[\sigma_1 + \sigma_2\left(e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{a}_1/2} + e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{a}_2/2}\right)\right]$$

A rácsösszeg miatt csak a Bragg-csúcsok jelennek meg, vagyis csak ott jelentkezik szórás, ahol $\Delta\mathbf{k}$ egy reciprokrács-vektor.

$$\Delta\mathbf{k} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$$

$$S(h,k) = \frac{2r_0 a}{\sqrt{h^2+k^2}}\sin\left(\sqrt{h^2+k^2}\frac{2\pi r_0}{a}\right)\left[\sigma_1 + \sigma_2(e^{ih\pi} + e^{ik\pi})\right] \propto \sigma_1 + \sigma_2((-1)^h + (-1)^k)$$

d) Az intenzitás arányos a szerkezeti tényező abszolútérték négyzetével.

$$I(h,k) \propto |S(h,k)|^2 \propto \sigma_1^2 + 2\sigma_1\sigma_2(-1)^h(1 + (-1)^{h+k}) + 2\sigma_2^2(1 + (-1)^{h+k})$$

Ha $h+k$ páros, akkor

$$I(h,k) \propto \sigma_1^2 + 4\sigma_1\sigma_2(-1)^h + 4\sigma_2^2.$$

Ha $h+k$ páratlan, akkor

$$I(h,k) \propto \sigma_1^2.$$

Intenzitás maximumot akkor kapunk, ha h is és k is páros. Intenzitás minimumot pedig akkor kapunk, ha h is és k is páratlan, amennyiben $|\sigma_2| < \sigma_1$. Ellenkező esetben a (páros; páratlan) Bragg-csúcsok lesznek a leghalványabbak.
e) Ha az r_0 sugarú atom sűrűség eloszlása

$$\rho(r) = \frac{r}{\pi r_0^4}$$

alakban írható, akkor az atomi szórási tényező számolásakor érdemes áttérni gömbi koordinátákra.

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \int \mathrm{d}^3 r \rho(\mathbf{r}) e^{i\Delta\mathbf{kr}} = 2\pi \int_0^{r_0}\int_0^{\pi} e^{i\Delta kr\cos\theta}\frac{r}{\pi r_0^4} r^2 \sin\theta \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta = \frac{4}{\Delta k r_0^4}\int_0^{r_0} dr\, r^2 \sin(\Delta k r) =$$

$$= \frac{4}{\Delta k r_0^4}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \Delta k^2}\right)\left[\int_0^{r_0} dr\ \sin(\Delta k r)\right]$$

Az integrálást és a kétszeres deriválást elvégezve kapjuk az alábbi eredményt.

$$f(\Delta\mathbf{k}) = \frac{4}{\Delta k r_0}\left[\frac{\cos(\Delta k r_0)}{\Delta k r_0} + \frac{2\sin(\Delta k r_0)}{(\Delta k r_0)^2} + \frac{2(\cos(\Delta k r_0)-1)}{(\Delta k r_0)^3}\right]$$

3.5.2. Gyémánt és GaAs szerkezeti tényezője

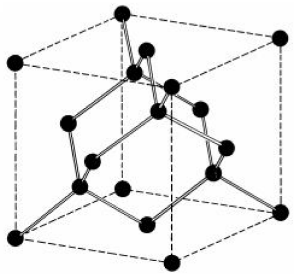
Tekintsük a gyémánt szerkezetét. A gyémánt kristályrácsa fcc (lapcentrált köbös). Az elemi cella két atomot tartalmaz, melyek közül az egyik az origóban, a másik az a rácsállandójú köbös cella testátlóját negyedelő pontban van. (Lásd 3.4. ábra)

a) Rajzold le vázlatosan a gyémánt szerkezetet, add meg az elemi cellát és a bázist!

b) Számítsd ki az fcc szerkezet reciprok rácsának bázisvektorait!

c) Határozd meg a gyémánt szerkezeti tényezõjét! Ábrázold a reciprok rácson a megfelelõ intenzitás értékeket!

d) A GaAs a gyémánttal azonos rácsot alkot, de az elemi cella két atomja közül az egyik Ga, a másik As, melyek pozíciói megegyeznek a gyémánt elemi cellájában található két szénatom pozíciójával, de a Ga és As atomi szórási tényezője különböző. Hogyan módosul a röntgen szórási kép GaAs-et vizsgálva a gyémánthoz képest?



3.4. ábra. Gyémántrács.

Megoldás:
a)-b)
Az elemi cella két atomot tartalmaz. Ezek elhelyezkedését a

$$\boldsymbol{\tau}_1 = 0 \qquad \boldsymbol{\tau}_2 = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3}{4}$$

vektorok határozzák meg,
ahol az elemi rácsvektorok az alábbiak szerint írhatók fel.

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Az elemi reciprokrács-vektorok pedig

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

c) Az atomi szórási tényező hullámszám függésével most nem foglalkozunk. A szerkezeti tényező

$$S(\Delta\mathbf{k}) = f\left(1 + e^{i\Delta\mathbf{k}\frac{\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2+\mathbf{a}_3}{4}}\right)$$

A rácsösszeg miatt csak $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ esetben történhet szóródás. Itt $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ és $\mathbf{b}_3$ az elemi reciprokrács-vektorok.

$$S(h,k,l) = f(1 + e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)})$$

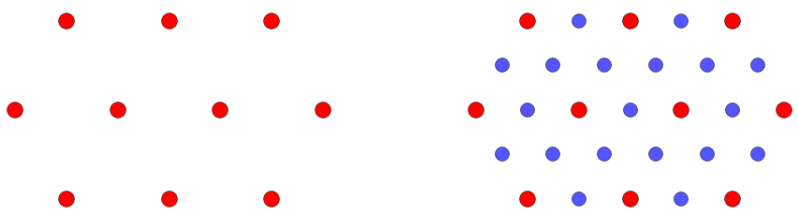
Tehát a szerkezeti tényező miatt kioltást találunk azoknál a reciprokrács-vektoroknál, melyekre $h+k+l$ páros, de $(h+k+l)/2$ páratlan.
d) GaAs esetén az atomi szórási tényezők nem egyeznek meg, ezért nem lesz kioltás a szerkezeti tényező miatt.

3.5.3. Kétdimenziós háromszögrács szórási képe

Tekintsünk egy kristályt egyatomos bázissal, melyben az atomok az egyik kristálytani tengelyre merőleges síkokban a rácsállandójú háromszög rácsot alkotnak a 3.5. ábrán látható módon és ezek a síkok a tengely irányában eltoltan $\sqrt{3}/2 \cdot a$ távolságonként ismétlődnek.
Ebből a kristályból pormintát készítünk és monokromatikus röntgennyalábbal rugalmas szórási kísérletet végzünk.

a) A rács elemi rácsvektorainak ismeretében add meg, milyen θ szórási szögeknél kapunk véges szórt intenzitást a Bragg feltétel alapján?

b) Abban az esetben, ha a kristály (ezen belül az őt alkotó háromszög rácsok) bázisa több atomossá válik az alábbi ábrának megfelelő módon, add meg a röntgen szórás szerkezeti tényezőjének reciprokrács-vektoroknál felvett értékét! Az f_A és f_B atomi szórási tényezők mely aránya esetén és mely reciprokrács-vektoroknál lesz a szerkezeti tényezõ miatt kioltás?



3.5. ábra. Háromszögrács egy- és többatomos bázissal.

c) Mely θ szórási szögeknél tűnik el a szórt intenzitás a szerkezeti tényező miatt?

Megoldás:
a) A Bragg-feltétel alapján olyan szögeknél van intenzitás maximum, melyekre

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{16\pi^2}|\mathbf{G}_{hkl}|^2.$$

Az elemi rácsvektorok az alábbi módon írhatók fel.

$$\mathbf{a}_1 = a\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = a\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_3 = a\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

A reciprokrács-vektorokra

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3.$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} -1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

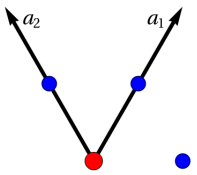
Így a Bragg-feltétel:

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

Itt h, k és l tetszőleges egész számok.
b) Az elemi cellában az atomok helyét a

$$\boldsymbol{\tau}_B = 0 \qquad \boldsymbol{\tau}_{A1} = \frac{\mathbf{a}_1}{2} \qquad \boldsymbol{\tau}_{A2} = \frac{\mathbf{a}_2}{2} \qquad \tau_{A3} = \frac{\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2}{2}$$

vektorok határozzák meg.



3.6. ábra. Elemi cella atomjai.

A szerkezeti tényező egy reciprokrács-vektornál az alábbi módon írható fel.

$$S(h,k,l) = \sum_{\boldsymbol{\tau}} f_{\boldsymbol{\tau}} e^{i\mathbf{G}_{hkl}\boldsymbol{\tau}} = f_A\left[(-1)^h + (-1)^k + (-1)^{h+k}\right] + f_B = \begin{cases} 3f_A + f_B & \text{ha } h \text{ is és } k \text{ is páros} \\ -f_A + f_B & \text{egyébként} \end{cases}$$

Látható, hogy $f_A = f_B$ esetén csak azoknál a reciprokrács-vektoroknál nincs kioltás, ahol h is és k is páros. Ha $f_B = -3f_A$, akkor pedig éppen ezeknél a reciprokrács-vektoroknál van csak kioltás. Ha f_A és f_B között ezektől különböző reláció áll fenn, akkor mindegyik reciprokrács-vektornak megfelelő szögnél találunk szóródást.
c) A Bragg-feltétel alapján a $\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{3a^2}\left(h^2 - hk + k^2 + l^2\right) = \frac{\lambda^2}{3a^2}N$ szögeknél van szórás.

$$N = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad \bullet \quad 7 \quad 8 \quad 9 \quad 10 \quad 11 \quad 12 \quad 13 \quad 14 \quad \bullet \quad 16 \quad \ldots$$

Ha $f_A = f_B$, akkor csak azoknál a reciprokrács-vektoroknál lehet szóródás, melyre h is és k is páros. Ebben az esetben már csak az alábbi N-k által meghatározott szög alatt találunk konstruktív interferenciát.

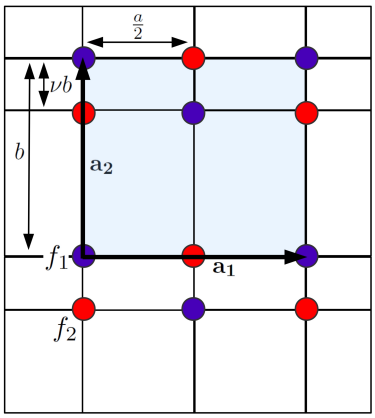
$$N = 0 \quad 1 \quad \bullet \quad \bullet \quad 4 \quad 5 \quad \bullet \quad \bullet \quad 8 \quad 9 \quad \bullet \quad \bullet \quad 12 \quad 13 \quad \bullet \quad \bullet \quad 16 \quad \ldots$$

Az $f_B = -3f_A$ esetben csak akkor van szórt intenzitás, ha h vagy k páratlan.

$$N = \bullet \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad \bullet \quad 7 \quad 8 \quad 9 \quad 10 \quad 11 \quad 12 \quad 13 \quad 14 \quad \bullet \quad 16 \quad \ldots$$

3.5.4. Rácstorzulás jele szóráskísérletekben

A 3.7. ábrán látható kétdimenziós kristályrács kétféle atomból épül fel és ν egy tetszőleges, 0 és 1 közé eső valós paraméter.



3.7. ábra. Kristályrács, az elemi cella és az elemi rácsvektorok az általános esetben.

a) Határozd meg a kristály bázisát! Hány atomot tartalmaz az elemi cella? Írd fel a rács elemi rácsvektorait!

b) Határozd meg a reciprokrácsot!

c) A kékkel jelölt atomok szórási tényezőjét jelöljük f_1-gyel, a pirosakét f_2-vel! Számold ki a szerkezeti tényezőt!

d) Mi történik, ha $\nu = 1/2$? Hol lesznek a megengedett és a tiltott reflexiók a reciprok térben?

Megoldás:
a) Tetszőleges $\nu \neq 1/2$ esetén az elemi cella a 3.7. ábrán világoskékkel jelölt terület, amelyhez két kék és két piros atom tartozik. Az elemi rácsvektorok:

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix}.$$

b) Az elemi reciprokrács vektorok:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{b} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

c) A szerkezeti tényező:

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\tau}_\alpha} f_\alpha(\Delta\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_\alpha} = f_1 \left(e^{i\Delta\mathbf{k}\frac{\mathbf{a}_1}{2}} + e^{-i\nu\Delta\mathbf{k}\,\mathbf{a}_2} \right) + f_2 \left(1 + e^{i\Delta\mathbf{k}\left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} - \nu\mathbf{a}_2\right)} \right),$$

ahol $\boldsymbol{\tau}_\alpha$ a szomszédos atomokon fut végig. A rácsösszeg miatt csak akkor kapunk szórási csúcsot, ha $\Delta\mathbf{k}$ reciprokrácsvektor, azaz $\Delta\mathbf{k} = n\mathbf{b}_1 + m\mathbf{b}_2$. Ekkor

$$S(\Delta\mathbf{k}) = f_1 \left(e^{in\pi} + e^{-im\nu 2\pi} \right) + f_2 \left(1 + e^{i(n-2\nu m)\pi} \right).$$

d) Vegyük most a $\nu = 1/2$ esetet. Ekkor megváltozik az elemi cella, és a rács lapcentrált négyzetes ráccsá válik - tehát voltaképpen egy, az eredetinél kisebb elemi cellájú ferdeszögű ráccsá. A magasabb szimmetria miatt bizonyos reflexiók tiltottá válnak,

$$S_{\nu=\frac{1}{2}}(\Delta\mathbf{k}) = \left(f_1 e^{-im\pi} + f_2 \right) \left(1 + e^{i(n+m)\pi} \right),$$

vagyis ha $n+m$ páratlan, akkor a Bragg-csúcs teljesen eltűnik. Ez annak a következménye, hogy a $\nu = 1/2$ esetben a rács szimmetriája magasabb.

3.5.5. Szerkezeti tényező köbös kristályban

Tekintsük a 3.8. ábrán látható háromdimenziós tércentrált köbös rács rácspontjain található atomokat, amelyeket homogén töltésű, r_0 sugarú gömbökkel modellezünk oly módon, hogy a kockák csúcsain elhelyezkedő atomok $-2q$, a kockák középpontjában elhelyezkedők pedig $-q$ töltéssel rendelkeznek.

a) Számítsd ki a kétféle atom atomi szórási tényezőjét!

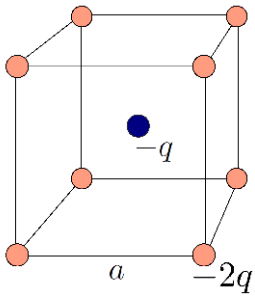
b) Határozd meg az elemi cellát és a reciprok rácsot!

c) Számold ki az elemi cellát jellemző szerkezeti tényezőt!

d) Milyen $\Delta\mathbf{k}$ szórásvektorra kapunk intenzitás-maximumokat, illetve -minimumokat? Milyen felületeket határoznak meg ezek a pontok a szórásvektorok terében?

Megoldás:
a) Az atomi szórási tényező a $-q$ töltésű atomokra

$$f_1(\Delta\mathbf{k}) = \int \mathrm{d}^3 r\, e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{r_0} \mathrm{d}r\, r^2 e^{i\Delta k r\cos(\theta)} =$$
$$= \rho_0 \int_0^{r_0} \mathrm{d}r\, \frac{2\pi}{i\Delta k} r \left[e^{i\Delta k r\cos(\theta)} \right]_0^\pi = \rho_0 \frac{2\pi}{i\Delta k} 2i \int_0^{r_0} \mathrm{d}r\, r\, \sin(\Delta k r),$$



3.8. ábra.

ahol

$$\rho(\mathbf{r}) = \begin{cases} \rho_0 = \frac{-q}{\frac{4\pi}{3} r_0^3}, & \text{ha } |\mathbf{r}| < r_0, \\ 0, & \text{ha } |\mathbf{r}| \geq r_0 \end{cases}$$

az atomok töltéssűrűsége. Áttérve az $x = \Delta k r$ változóra

$$f_1(\Delta\mathbf{k}) = 4\pi \frac{\rho_0}{(\Delta k)^3} \int_0^{\Delta k r_0} \mathrm{d}x\, x\, \sin(x) = 4\pi \frac{\rho_0}{(\Delta k)^3} \left(\sin(\Delta k r_0) - \cos(\Delta k r_0)\, \Delta k r_0\right) =$$
$$= 3q\, \frac{\cos(\Delta k r_0)\, \Delta k r_0 - \sin(\Delta k r_0)}{(\Delta k r_0)^3}.$$

A $-2q$ töltésű atomok atomi szórási tényezője pedig $f_2(\Delta\mathbf{k}) = 2f_1(\Delta\mathbf{k})$.
b) Az elemi cella egy kék és egy piros atomot tartalmaz, és a kristályrács köbös rács. Az elemi rácsvektorok

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{pmatrix},$$

a reciprokrács elemi rácsvektorai pedig

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

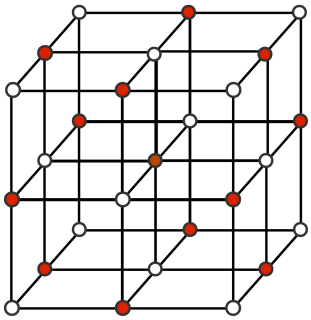
c) A szerkezeti tényező

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\tau}_\alpha} f_\alpha(\Delta\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}_\alpha} = f_1 + f_2 e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2+\mathbf{a}_3)/2},$$

ahol $\boldsymbol{\tau}_\alpha$ a szomszédos rácspontok helyvektorain fut végig. Legyen $\Delta\mathbf{k} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$, így

$$S(\Delta\mathbf{k}) = f_1 \left(1 + 2e^{i\pi(n_1+n_2+n_3)}\right),$$

tehát ha $n_1 + n_2 + n_3$ páros, erősítést, ha páratlan, akkor gyengítést kapunk.
d) A 3.9. ábrán a reciprok rács látható. A pirossal jelölt rácspontoknak megfelelő $\Delta\mathbf{k}$-kra kapunk erősítést, a szürkével jelöltekre gyengítést. Látható, hogy az erősítések pontjai kristálysíkokba rendeződnek. Ezek a síkok az $(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$ valós térbeli vektorra merőlegesek. Minden második ilyen reciprokrács síkban kapunk erősítést, a többiben gyengítést.



3.9. ábra. Az erősítések és kioltások reciprokrács térben.

3.5.6. Összetett bázisú kristály szerkezeti tényezője

Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot a rácsállandóval. A kristály a 3.10. ábrán látható, egymáshoz csúcsaikkal érintkező oktaéderekből épül fel. Az oktaéder csúcsaiban lévő atomok szórási tényezője $-f$, míg a középpontban lévőké $-3f$. Az oktaéder szemközti csúcsainak távolsága a rácsállandó, a.

a) Határozd meg az elemi rácsot, és add meg az elemi rácsvektorokat!

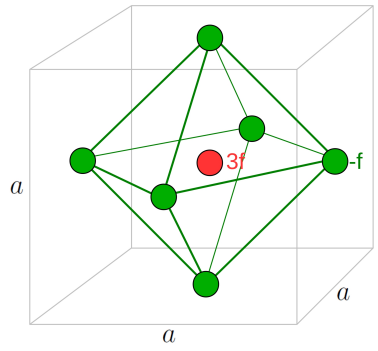
b) Számold ki az elemi cellát jellemző szerkezeti tényezőt!

c) Rajzold fel a szerkezeti tényező hullámszám függését a $\mathbf{k}$-térbeli $(1, 1, 1)$ irányban!

d) Milyen $\Delta\mathbf{k}$ reciprokrács-vektorokra eredményez a szerkezeti tényező kioltást az intenzitásban?

Megoldás:
a) Az elemi cella legyen a 3.10. ábrán látható kocka, az origó pedig a kocka (és az oktaéder) középpontja. Az elemi rácsvektorok

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{pmatrix}.$$



3.10. ábra. Köbös rács oktaéder alakban elhelyezkedő atomokkal.

Az elemi cellához 4 atom tartozik. Ezek helyvektorai $\mathbf{0}$, $\frac{\mathbf{a}_1}{2}$, $\frac{\mathbf{a}_2}{2}$, és $\frac{\mathbf{a}_3}{2}$, amennyiben az origót az oktaéder közepén elhelyezkedő atomhoz rögzítjük. A reciprok rács köbös, elemi rácsvektorai:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

b) A szerkezeti tényezőt az elemi cellához tartozó 4 atom szórási tényezőjéből kapjuk.

$$S(\Delta\mathbf{k}) = -3f - f\left(e^{i\Delta\mathbf{k}\,\mathbf{a}_1/2} + e^{i\Delta\mathbf{k}\,\mathbf{a}_2/2} + e^{i\Delta\mathbf{k}\,\mathbf{a}_3/2}\right).$$

Hogyha $\Delta\mathbf{k} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$, akkor

$$S(\Delta\mathbf{k}) = -3f\left(1 + \frac{\cos(n_1\pi) + \cos(n_2\pi) + \cos(n_3\pi)}{3}\right).$$

c) Ha $\Delta\mathbf{k} \parallel (1,1,1)$, akkor $\Delta\mathbf{k} = n\,(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3)$-ként írható, és a szerkezeti tényező

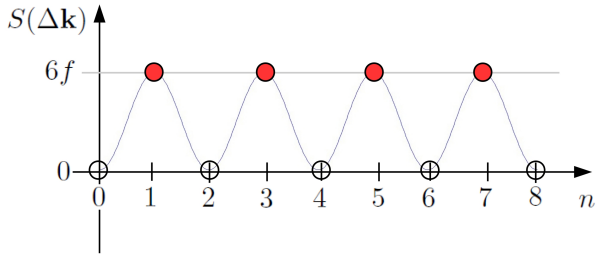
$$S(\Delta\mathbf{k}) = 3f\,(1 + \cos(n\pi))$$

alakban írható. Tehát, ahogy az a 3.11. ábrán látható, páratlan n-ekre kioltást (üres körök), párosokra pedig erősítést kapunk (teli körök).
d) Ahhoz, hogy $S(\Delta\mathbf{k})$-ban kioltást találjunk, $\cos(n_1\pi) + \cos(n_2\pi) + \cos(n_3\pi) = -3$ kell, tehát mindegyik cos-nak a minimális értéket kell felvennie. Ez csak akkor lehetséges, hogyha n_1, n_2 és n_3 is páratlan.

3.5.7. Perovszkit kristályszerkezet

Vizsgáljuk meg a perovszkit szerkezetű kristály (ABO_3, 1.7. ábra) szórási tulajdonságait!

a) Határozd meg az elemi rácsot, és add meg az elemi rácsvektorokat!



3.11. ábra.

b) Számold ki az elemi cellát jellemző szerkezeti tényezőt!

c) Okoz-e a szerkezeti tényező kioltást az intenzitásban valamelyik csúcsnál, ha $f_A = f_B$?

Megoldás:
A perovszkit szerkezet kristályrácsa egy köbös rács. Az elemi cella 5 atomot tartalmaz, melyek helyzetét az elemi cellán belül az alábbi vektorok adják meg.

$$\boldsymbol{\tau}_A = 0 \qquad \boldsymbol{\tau}_B = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3}{2} \qquad \boldsymbol{\tau}_{O1} = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{2} \qquad \boldsymbol{\tau}_{O2} = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3}{2} \qquad \boldsymbol{\tau}_{O3} = \frac{\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3}{2}$$

Ezek alapján a szerkezeti tényező

$$S(\mathbf{G}_{hkl}) = f_A + f_B(-1)^{h+k+l} + f_O\left((-1)^{h+k} + (-1)^{k+l} + (-1)^{h+l}\right).$$

Ha $f_A = f_B$, akkor a szerkezeti tényező első két tagja kiejti egymást, amennyiben $h+k+l$ páratlan. Az utolsó tag, amely az oxigén atomokon történő szóródást írja le, azonban nem tűnik el, akármilyen értéket vesznek is fel h, k és l.

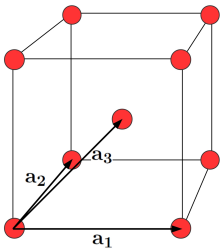
3.5.8. Tércentrált köbös rács szórási képe

A kálium (K) tércentrált köbös rácsban kristályosodik. A köbös cella oldaléle $a = 0,52\,\mathrm{nm}$.

a) A K atom elektroneloszlását modellezzük egy homogén töltéseloszlású, $r_0 = 0.46\,\mathrm{nm}$ sugarú, q töltésű gömbbel. Számítsd ki az atom röntgenszórási alaktényezőjét!

b) A kristályon szóráskísérletet végzünk $\lambda = 0,1\,\mathrm{nm}$ hullámhosszú röntgensugarakkal. Határozd meg a köbös cella [111], [200] és [211] reflexióihoz tartozó $\sin\theta$ értékét, ahol 2θ a bejövő és a szórt röntgensugarak által bezárt szög! Az elemi rácsvektorokat a 3.12. ábrának megfelelően vedd fel.

c) Mekkora az [111] és [200] irányokhoz tartozó szórási intenzitások aránya?



3.12. ábra. Tércentrált köbös rács elemi rácsvektorai.

Megoldás:
a) Az atomi szórási tényezőt ugyanúgy kell kiszámolni, mint a 3.5.5 feladatnál.

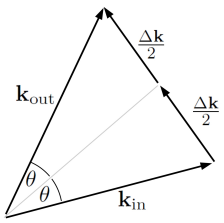
$$f(\Delta\mathbf{k}) = 3q\,\frac{\sin(\Delta k r_0) - \cos(\Delta k r_0)\,\Delta k r_0}{(\Delta k r_0)^3}$$

b) A 3.13. ábra szerint

$$\frac{\Delta k}{2} \equiv \frac{|\Delta\mathbf{k}|}{2} = |\mathbf{k}_{\text{in}}|\sin\theta = \frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta,$$

azaz

$$\sin\theta = \frac{\lambda\Delta k}{4\pi}.$$



3.13. ábra.

Így csak Δk-t kell meghatároznunk a három kívánt esetben. Az elemi rácsvektorok a 3.12. ábra szerint

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

amelyekből kiszámolhatjuk a reciprokrács elemi rácsvektorait:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Számoljuk ki a három kívánt esetben $\sin\theta$ értékét!

$$[111]: \ \Delta k = |\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3| = \frac{2\pi}{a}\left|\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}\right| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2} \ \longrightarrow \ \sin\theta \simeq 0,136\,,$$

$$[200]: \ \Delta k = 2\,|\mathbf{b}_1| = \frac{4\pi}{a}\left|\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}\right| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2} \ \longrightarrow \ \sin\theta \simeq 0,27\,,$$

$$[211]: \ \Delta k = |2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3| = \frac{2\pi}{a}\left|\begin{pmatrix}2\\1\\-1\end{pmatrix}\right| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{6} \ \longrightarrow \ \sin\theta \simeq 0,23\,.$$

c) Most számoljuk ki, hogy mekkora a két szórás $\left|\frac{f(\Delta\mathbf{k}=[111])}{f(\Delta\mathbf{k}=[200])}\right|^2$ relatív intenzitása! Behelyettesítve az $f(\Delta\mathbf{k})$-ra az a) részben kapott értékeket kapjuk, hogy

$$\left|\frac{f(\Delta\mathbf{k}=[111])}{f(\Delta\mathbf{k}=[200])}\right|^2 = 7,6\cdot 10^{-4}\,,$$

vagyis az [111] esetben kapott intenzitás elhanyagolhatóan halvány a szórási képen a [200]-hoz tartozó csúcs mellett.

3.6. Házi feladatok

5. házi feladat

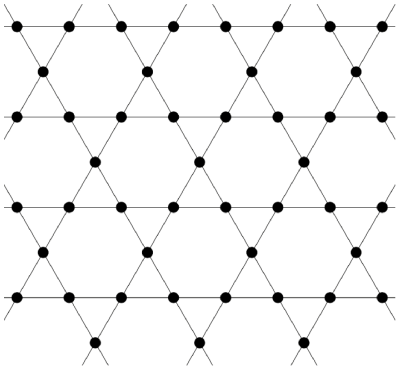
Tekintsük azt a lapcentrált köbös rácsot, melynek minden rácspontjában egy C_{60} (fullerén) molekula helyezkedik el.

a) Számítsd ki a C_{60} molekula atomi szórási tényezõjét ($f(\Delta\mathbf{k})$), feltételezve, hogy a fullerén teljesen gömb alakú és az elektronok a fullerén labda felületén egyenletes töltéssûrûséggel helyezkednek el. (Minden szénatomnak 6 elektronja van, a fullerén labda sugara $0,35$ nm.)

b) Határozd meg a reciprok rácsot! Becsüld meg, hogy hány Bragg-csúcsot láthatunk a szórási képen, ha figyelembe vesszük az atomi szórási tényezőt is és a rácsállandó $1,4$ nm?

6. házi feladat

Tekintsd az ábrán látható kagome-rácsot. Mi a Bravais rács és hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezõjét, ha az atomi szórási tényezõ f. Okoz-e a szerkezeti tényezõ kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén!



3.14. ábra. Kagome-rács

7. házi feladat

Az A típusú atomokból álló négyzetrács esetén a négyzetek középpontjába helyezzünk B típusú atomokat. (Ekkor az A és B atomok külön-külön egymáshoz képest eltolt négyzetrácsot alkotnak. $A = B$ esetén centrált négyzetrácshoz jutunk.) Hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezõjét, ha az atomi szórási tényezõ a kétféle atomra f_A és f_B. Határozd meg, hogy milyen f_A/f_B aránynál okoz a szerkezeti tényezõ kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén! Mi ennek a magyarázata?

8. házi feladat

A CuO_2 sík olyan szerkezet, ahol a Cu atomok egyszerû négyzetrácsot alkotnak és az O atomok a szomszédos Cu atomokat összekötõ szakaszok felezõpontjában találhatók. Hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezõjét, ha az atomi szórási tényezõ a kétféle atomra f_{Cu} és f_{O}. Határozd meg, hogy milyen $f_{\mathrm{Cu}}/f_{\mathrm{O}}$ aránynál okoz a szerkezeti tényezõ kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprokrács-vektor esetén!

4. fejezet

Debye-Waller-faktor, véletlen ötvözetek szórási képe

Az előzőekben feltételeztük, hogy a kristályt alkotó atomok rögzítettek. Tudjuk azonban, hogy egy nem zérus hőmérsékletű anyagban az atomok egyensúlyi helyzetük körül rezgő mozgást végeznek. Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk, hogy a termikus mozgás hogyan módosítja a szórási képet.

4.1. Debye-Waller-faktor

Véges hőmérsékletű kristályban (az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy egyatomos az elemi cella) az atomok helyzete függ az időtől: $\mathbf{R}_n + \mathbf{u}_n(t)$. Tegyük fel, hogy az $\mathbf{u}_n$ elmozdulásvektor u_{nj} komponensei független, normális eloszlású valószínűségi változók.

$$\phi(u_{nj}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{u_{nj}^2}{2\sigma^2}} \qquad \langle u_{nj} \rangle = 0 \qquad \langle u_{nj} u_{n'j'} \rangle = \delta_{nn'}\delta_{jj'}\sigma^2$$

A hőmérséklettől való függést a valószínűségi változók σ szórása hordozhatja. Magasabb hőmérsékleten a szórás is nagyobb, de a pontos hőmérsékletfüggést itt nem specifikáljuk. A szórási kísérletben a szórási amplitúdó és az intenzitás

$$A(\Delta\mathbf{k}) = f(\Delta\mathbf{k}) \sum_n e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{R}_n + \mathbf{u}_n)} \qquad I(\Delta\mathbf{k}) = |A(\Delta\mathbf{k})|^2 = |f(\Delta\mathbf{k})|^2 \sum_{nm} e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{R}_n + \mathbf{u}_n - \mathbf{R}_m - \mathbf{u}_m)}$$

szerint írhatók. A szórási kép meghatározásához az intenzitást átlagolnunk kell a termikus mozgásból adódó véletlenszerűségre.

$$\langle I(\Delta\mathbf{k}) \rangle = |f(\Delta\mathbf{k})|^2 \sum_{nm} e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} \langle e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_m)} \rangle \tag{4.1}$$

Ha $n \neq m$, akkor a valószínűségi változók függetlensége miatt

$$\langle e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{u}_n-\mathbf{u}_m)}\rangle = \prod_j \left[\langle e^{i\Delta k_j u_{nj}}\rangle\langle e^{-i\Delta k_j u_{mj}}\rangle\right]$$

teljesül. A normális eloszlás sűrűségfüggvényét felhasználva

$$\langle e^{i\Delta k_j u_{nj}}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}u_{nj}\, \phi(u_{nj}) e^{i\Delta k_j u_{nj}} = e^{-\frac{\Delta k_j^2\sigma^2}{2}}$$

és így

$$\langle e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{u}_n-\mathbf{u}_m)}\rangle = e^{-\Delta k^2\sigma^2}.$$

Ha $n = m$, akkor

$$\langle e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{u}_n-\mathbf{u}_m)}\rangle = 1.$$

Összefoglalva

$$\langle e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{u}_n-\mathbf{u}_m)}\rangle = \delta_{nm} + (1-\delta_{nm})e^{-\Delta k^2\sigma^2} = \delta_{nm}(1-e^{-\Delta k^2\sigma^2}) + e^{-\Delta k^2\sigma^2}$$

szerint írhatjuk fel a várható értéket. Az intenzitás (4.1) kifejezésébe ezt behelyettesítve

$$\langle I(\Delta\mathbf{k})\rangle = |f(\Delta\mathbf{k})|^2 \left[N(1-e^{-\Delta k^2\sigma^2}) + e^{-\Delta k^2\sigma^2}\sum_{nm} e^{\Delta\mathbf{k}(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_m)}\right] =$$

$$= |f(\Delta\mathbf{k})|^2 \left[N(1-e^{-\Delta k^2\sigma^2}) + N^2 e^{-\Delta k^2\sigma^2}\sum_{\mathbf{G}} \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}\right]$$

adódik, ahol

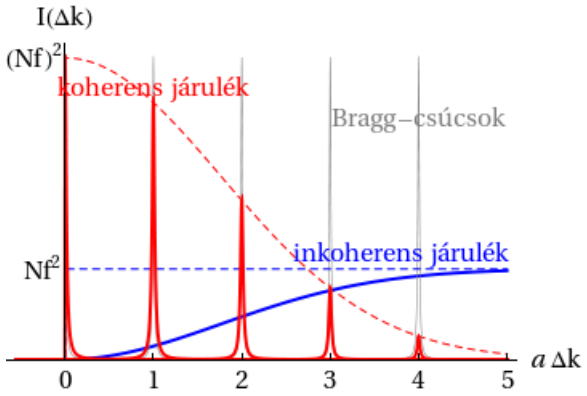
$$\langle I(\Delta\mathbf{k})\rangle_{\text{incoh}} = |f(\Delta\mathbf{k})|^2 N(1 - \underbrace{e^{-\Delta k^2\sigma^2}}_{\text{Debye-Waller-faktor}})$$

$$\langle I(\Delta\mathbf{k})\rangle_{\text{coh}} = |f(\Delta\mathbf{k})|^2 N^2 \underbrace{e^{-\Delta k^2\sigma^2}}_{\text{Debye-Waller-faktor}} \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}$$

az intenzitás inkoherens és koherens járuléka. Megjegyezzük, hogy az inkoherens tag minden hullámszám esetén ad járulékot, míg a koherens tag csak a reciprokrács-vektoroknál nem zérus (ebből ered az elnevezése is).

4.2. Véletlen (híg) ötvözetek

Itt egy olyan Bravais-rács szórási képét mutatjuk be, melyben a rácshelyeken ülő atomok véletlenszerűen lehetnek A vagy B típusúak. Ekkor az $\mathbf{R}_n$ rácspontokban ülő atomok



4.1. ábra. Rács termikus mozgásából adódó koherens és inkoherens járulékok a szórási képben.

atomi szórási tényezői egymástól független, diszkrét valószínűségi változók. A tényező p_A valószínűséggel lesz f_A és $p_B = 1 - p_A$ valószínűséggel lesz f_B.

$$\langle f_n \rangle = f_A p_A + f_B p_B := \langle f \rangle$$

$$\langle f_n f_m \rangle = \begin{cases} \langle f_n^2 \rangle & \text{ha} \quad n = m \\ \langle f_n \rangle \langle f_m \rangle & \text{ha} \quad n \neq m \end{cases}$$

$$\langle f_n^2 \rangle = f_A^2 p_A + f_B^2 p_B := \langle f^2 \rangle$$

$$\langle f_n f_m \rangle = \delta_{nm} \langle f^2 \rangle + (1 - \delta_{nm}) \langle f \rangle^2 = \delta_{nm} \left(\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \right) + \langle f \rangle^2 = \delta_{nm} \Delta f^2 + \langle f \rangle^2$$

A szórási képen az intenzitás adott $\Delta\mathbf{k}$ hullámszámnál

$$I(\Delta\mathbf{k}) = \sum_{nm} f_n f_m e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)},$$

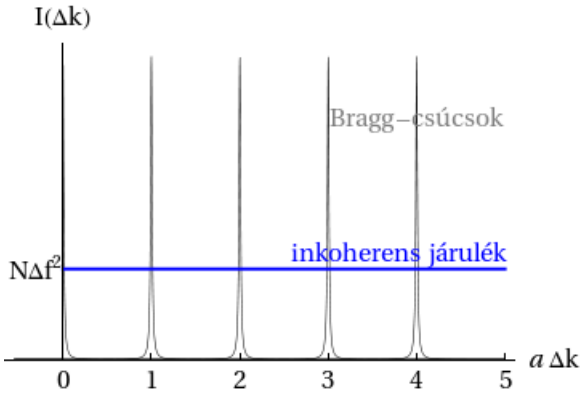
és a várható értéke

$$\langle I(\Delta\mathbf{k}) \rangle = \sum_{nm} \langle f_n f_m \rangle e^{i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} = N\Delta f^2 + N^2 \langle f \rangle^2 \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}} \,.$$

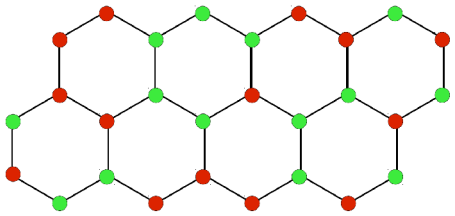
A várható értékben az első tag az inkoherens járulék, mely egy konstans hátteret jelent a Bragg-csúcsok mögött. A második tag, a koherens járulék, a Bragg-csúcsokat modulálja.

4.2.1. Véletlen ötvözet hatszögrácson

Egy grafénrácsban teljesen véletlenszerűen helyezkednek el a A és B típusú atomok 50-50% valószínűséggel, független eloszlás szerint. Az atomi szórási tényezőik f_A és f_B, amelyekről feltesszük, hogy hullámszám-függetlenek. Mekkora lesz az inkoherens szórt



4.2. ábra. Koherens és inkoherens járulékok a szórási képben híg ötvözetek esetén.



4.3. ábra. Grafénrács véletlenszerűen elosztott atomokkal.

intenzitás aránya a teljes intenzitáshoz képest?

Megoldás:

Hasonlóan a 4.2-es számoláshoz, az intenzitást átlagolva a szennyezők eloszlására kapjuk az intenzitás inkoherens és koherens járulékát:

$$\langle I(\Delta\mathbf{k})\rangle = \langle |\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{R}_n} S_n(\Delta\mathbf{k})|^2\rangle = N\,\Delta S^2(\Delta\mathbf{k}) + N^2 \sum_{\mathbf{G}} |\langle S(\Delta\mathbf{k})\rangle|^2 \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}}\,. \qquad (4.2)$$

ahol $\langle S(\Delta\mathbf{k})\rangle$ és $\Delta S(\Delta\mathbf{k})$ a struktúra faktor várható értéke és szórásnégyzete és N a rácshelyek száma. A struktúra faktor $S(\Delta\mathbf{k}) = f_1 + f_2\, e^{i\tau\Delta\mathbf{k}}$ szerint függ a hullámszámtól, ahol $\tau = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3$ az elemi cellán belül az egyik atomból a másikba mutató vektor, míg f_1 és f_2 az elemi cellán belüli atomok szórásténye zője. Mind f_1, mind f_2 diszkrét valószínűségi változók, melyek $1/2$ valószínűséggel vesznek fel f_A és $1/2$ valószínűséggel

f_B értéket. A megfelelő várható értékek

$$\langle S(\Delta\mathbf{k})\rangle = \langle f\rangle \left(1 + e^{i\tau\Delta\mathbf{k}}\right), \tag{4.3}$$

$$\Delta S^2(\Delta\mathbf{k}) = \langle |S|^2\rangle - |\langle S\rangle|^2 = \langle |f_1 + f_2\, e^{i\tau\Delta\mathbf{k}}|^2\rangle - |\langle S\rangle|^2 = 2\left(\langle f^2\rangle - \langle f\rangle^2\right) = 2\,\Delta f^2, \tag{4.4}$$

ahol számolás közben kihasználtuk, hogy $\langle f_1^2\rangle = \langle f_2^2\rangle = \langle f^2\rangle$, és $\langle f_1\, f_2\rangle = \langle f\rangle^2$. Így

$$\langle I(\Delta\mathbf{k})\rangle = 2N\,\Delta f^2 + N^2\,\langle f\rangle^2 \sum_{\mathbf{G}} |1 + e^{i\tau\Delta\mathbf{k}}|^2 \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}} =$$

$$= 2N\,\Delta f^2 + N^2\,\langle f\rangle^2 \sum_{\mathbf{G}_{hk}} |1 + e^{i2\pi(h+k)/3}|^2 \delta_{\Delta\mathbf{k},\mathbf{G}_{hk}}.$$

Az A és B atomok 50-50%-os eloszlásából könnyen kiszámolható, hogy $\Delta f^2 = (f_A - f_B)^2/4$, és $\langle f\rangle^2 = (f_A + f_B)^2/4$.

Ha ki akarjuk számolni a teljes szórt inkoherens járulékot, akkor fel kell összegeznünk az összes $\Delta\mathbf{k}$ hullámszámra. A hullámszámteret felbonthatjuk az első Brillouin-zóna eltoltjai szerint, és az összegzést elvégezhetjük külön-külön ezekre a cellákra. (Mivel az inkoherens járulék független $\Delta\mathbf{k}$-tól, minden cellában ugyanakkora járulékot fogunk kapni.) Az első Brillouin-zónában pontosan N darab $\Delta\mathbf{k}$ hullámszámérték van, mert ennyi a rácshelyek száma is. Ezért az első Brillouin-zónára vett összegzés $\sum_{BZ} I_{\text{inkoh}}(\Delta\mathbf{k}) = 2N^2(f_A - f_B)^2/4$ értéket ad.

A szórt koherens járulékhoz az első Brillouin-zónából csak a $h = k = 0$ reciprokrács-vektor járul hozzá. Azonban a többi reciprokrács-vektor járuléka h és k értékétől függően változik: $|1 + e^{2\pi i\frac{h+k}{3}}|^2$ értéke az esetek 1/3 részében 4, a többi esetben pedig 1. Így átlagosan $4 \times 1/3 + 1 \times 2/3 = 2$ járulékot kapunk, és a koherens intenzitás reciprokrács-vektorokra vett átlaga $\overline{I_{koh}} = 2N^2\,(f_A + f_B)^2/4$ lesz. Tehát az inkoherens összintenzitás teljes szórt intenzitáshoz képesti aránya

$$\frac{I_{\text{inkoh}}}{I_{\text{koh}} + I_{\text{inkoh}}} = \frac{(f_A - f_B)^2}{(f_A - f_B)^2 + (f_A + f_B)^2} = \frac{1}{2} - \frac{f_A\, f_B}{f_A^2 + f_B^2}. \tag{4.5}$$

5. fejezet

Rácsrezgések

5.1. Harmonikus közelítés

Az atomok termikus mozgására egy pontosabb leírást adhatunk rácsrezgések figyelembe vételével. A kristályt felépítő atomok teljes energiája

$$E = E_{\text{kin}} + U$$

szerint írható. A kifejezésben

$$E_{\text{kin}} = \sum_{n\alpha} \frac{p_{n\alpha}^2}{2M_{n\alpha}}$$

az atomok kinetikus energiája, ahol n az $\mathbf{R}_n$ rácsvektor által kijelölt elemi cellát, α pedig egy elemi cellán belül az atomokat (τ_α adja meg az elemi cellán belüli elhelyezkedését ennek a típusú atomnak) indexeli. $M_{n\alpha}$ az $\mathbf{R}_n$ cellában levő, α típusú atom tömege. A kölcsönhatást

$$U = \frac{1}{2} \sum_{nn'\alpha\alpha'} \Phi_{\alpha\alpha'} \left(\mathbf{r}_{n\alpha}(t) - \mathbf{r}_{n'\alpha'}(t) \right)$$

alakban írhatjuk fel a $\Phi_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r})$ párpotenciál és az atomok pillanatnyi elhelyezkedését leíró $\mathbf{r}_{n\alpha}(t)$ függvény segítségével.

$$\mathbf{r}_{n\alpha}(t) = \mathbf{R}_n + \tau_\alpha + \mathbf{u}_\alpha(n,t)$$

Harmonikus közelítésben feltesszük, hogy az atomok helyzetének egyensúlyitól való eltérése $\mathbf{u}_\alpha(n,t)$ kicsi. A kitérésekben elsőrendű járulék zérus az egyensúly miatt. A kölcsönhatási energiát másodrendig fejtjük sorba (ez magával vonja azt is, hogy az egyensúlyból kimozdított atomokra ható erők eredője lineárisan függ az $\mathbf{u}_\alpha(n)$ mennyiségektől). A sorfejtés eredményeképpen jutunk a teljes energia

$$E\left(\{p_{jn\alpha}\}, \{u_{j\alpha}(n)\}\right) = \sum_{jn\alpha} \frac{p_{jn\alpha}^2}{2M_{n\alpha}} + U_0 + \frac{1}{2} \sum_{jj'nn'\alpha\alpha'} u_{j\alpha}(n,t) D'_{jj'\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) u_{j'\alpha'}(n',t)$$

kifejezésére. Itt bevezettük a $\mathbf{D}'(\Delta\mathbf{R})$ mátrixot, mely a párpotenciál második deriváltjait tartalmazza. Ha az elemi cella I különböző atomot tartalmaz egy d dimenziós kristályban, akkor ez a mátrix $(Id) \times (Id)$-s méretű minden $\Delta\mathbf{R}$ rácsvektorra. A kanonikus egyenletek

$$\dot{u}_{j\alpha}(n) = \frac{p_{jn\alpha}}{M_{n\alpha}}$$

$$\dot{p}_{jn\alpha} = -\sum_{j'n'\alpha'} D'_{jj'\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})u_{j'\alpha'}(n'),$$

melyek alapján a mozgásegyenletek

$$M_{n\alpha}\ddot{\mathbf{u}}_\alpha(n) = -\sum_{n'\alpha'} \mathbf{D'}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})\mathbf{u}_{\alpha'}(n')$$

alakban írhatók. Megjegyezzük, hogy ez az NId db egyenlet bonyolult módon csatolódik egymáshoz (N az elemi cellák száma). Egy gyakorlati példa megoldását általában azzal kell kezdeni, hogy ezeket a mozgásegyenleteket felírjuk. Lineáris differenciál egyenletrendszerről lévén szó feltehetjük, hogy a mozgásegyenletek megoldása felírható

$$\mathbf{u}_\alpha(n,t) = \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q})e^{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_n - \omega(\mathbf{q})t)}$$

síkhullám alakban a Brillouin-zóna $\mathbf{q}$ hullámszámaival. Ezzel a lineáris differenciál egyenletrendszer helyett lineáris egyenletrendszerre jutunk. Ha a rendszer eltolási invariáns, vagyis $M_{n\alpha} = M_\alpha$, akkor a mozgásegyenletek a $\mathbf{q}$ hullámszámok szerint szétcsatolódnak. Azért elegendő az első Brillouin-zóna hullámszámaival jellemezni a rácsrezgéseket, mert egy $\mathbf{G}$ reciprokrács-vektorral a $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ hullámszámú hullám az atomok helyén ugyanazt az értéket adja, mint a $\mathbf{q}$ hullámszámú hullám.

$$-M_\alpha\omega^2(\mathbf{q})u_{j\alpha}(\mathbf{q}) = -\sum_{j\alpha} D'_{jj'\alpha\alpha'}(\mathbf{q})u_{j'\alpha'}(\mathbf{q})$$

Legyen $v_{j\alpha}(\mathbf{q}) = \sqrt{M_\alpha}u_{j\alpha}(\mathbf{q})$ és definiáljuk a $D_{jj'\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) = D'_{jj'\alpha\alpha'}(\mathbf{q})/\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}$ dinamikus mátrixot! Utóbbiról belátható, hogy önadjungált és pozitív definit. A hullámszámtérbeli mozgásegyenletek ekkor

$$\omega^2(\mathbf{q})v_{j\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{j'\alpha'} D_{jj'\alpha\alpha'}(\mathbf{q})v_{j'\alpha'}(\mathbf{q}) \tag{5.1}$$

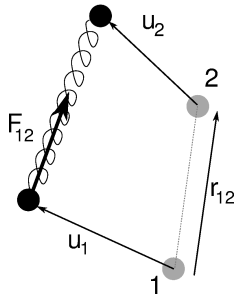
szerint írhatók, vagyis minden $\mathbf{q}$ hullámszámra egy megfelelő sajátérték egyenletet megoldva megkaphatjuk az $\omega(\mathbf{q})$ diszperziós relációt. A dinamikus mátrix pozitív szemidefinit, ezért az $\omega(\mathbf{q})$ rezgési frekvenciák valósak. A sajátvektorok megadják a rácsrezgések polarizációját, vagyis azt, hogy az atomok hogyan mozdulnak el egymáshoz képest egy elemi cellán belül. Megjegyezzük, hogy a $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ mátrix Id dimenziós, ezért Id különböző

sajátértéket (diszperziós ágat) kaphatunk, melyek közül d db akusztikus ág és $(I-1)d$ db optikai ág.

A (5.1) egyenleteknek összesen NId megoldása lesz, hiszen a Brillouin-zóna N darab $\mathbf{q}$ hullámszámot tartalmaz. A szabadsági fokok száma (NI atom esetén, d dimenzióban ez éppen NId) nem változott a Fourier-transzformáció során.

5.2. Rácsrezgések rugós modellje

Az előzőekben említettük, hogy harmonikus közelítésben az atomokra ható eredő erők az egyensúlyi helyükből való kis kitérésektől lineárisan függnek, vagyis az atomok közti kölcsönhatást modellezhetjük úgy, mintha rugókkal lennének összekötve. A fenti, általános leírásban minden atomot mindegyik másikkal összekötötte egy rugó. A modellt tovább fogjuk egyszerűsíteni azzal, hogy csak a legerősebb rugókat vesszük figyelembe (első-, vagy másodszomszéd kölcsönhatásokat).



5.1. ábra. Egy kristály két tetszőleges atomja közti rugóerő.

Először egy általános formulát vezetünk le, mely két tetszőlegesen elhelyezkedő atom közti rugóerőt adja meg az elmozdulások lineáris rendjében. A 5.1. ábrán látható elrendezésben az 1. atomra ható rugóerő

$$\mathbf{F}_{12} = \underbrace{\frac{\mathbf{r}_{12}+\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_1}{|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_1|}}_{\text{irány}} \underbrace{\Big[F_0 + k\left(|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_1| - |\mathbf{r}_{12}|\right)\Big]}_{\text{nagyság}},$$

ahol az első tört az erő irányát, a második tényező pedig annak nagyságát határozza meg. A képletben F_0 a rugó előfeszítettségét (egy rugó előfeszített, ha akkor is meg van feszítve, amikor az atomok egyensúlyi helyzetükben vannak) jelöli, k pedig a rugó állandó. Legyen $\Delta\mathbf{u} = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1$ az elmozdulások különbsége! Harmonikus közelítésben $\Delta\mathbf{u}$ kicsi. Az erőt ebben első rendig sorba fejthetjük. Az erő irányából származó járulék

$$\frac{\mathbf{r}_{12}+\Delta\mathbf{u}}{|\mathbf{r}_{12}+\Delta\mathbf{u}|} \approx \frac{1}{|\mathbf{r}_{12}|}\left(\mathbf{r}_{12}+\Delta\mathbf{u} - \frac{(\mathbf{r}_{12}\Delta\mathbf{u})\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|^2}\right)$$

és az erő nagyságából származó járulék

$$F_0 + k\left(|\mathbf{r}_{12} + \Delta\mathbf{u}| - |\mathbf{r}_{12}|\right) \approx F_0 + k\frac{\mathbf{r}_{12}\Delta\mathbf{u}}{|\mathbf{r}_{12}|}$$

lesz. A teljes rugóerő $\Delta\mathbf{u}$-ban első rendig

$$\mathbf{F}_{12} \approx F_0\frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|} + \left(\frac{F_0}{|\mathbf{r}_{12}|} + \left(k - \frac{F_0}{|\mathbf{r}_{12}|}\right)\frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|} \circ \frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|}\right)\Delta\mathbf{u} \tag{5.2}$$

alakban írható, ahol $\circ$ a diadikus szorzást jelöli. Megjegyezzük, hogy a nulladrendű tag kiesik, ha az 1. atom több szomszédját is figyelembe vesszük, hiszen kitérés nélkül az atom egyensúlyban van.

Az általános (5.2) formula alapján néhány speciális esetben is megadhatjuk az erő kifejezését. Ha a rugó nincs előfeszítve, vagyis $F_0 = 0$, akkor

$$\mathbf{F}_{12} = k\frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|} \circ \frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|}\Delta\mathbf{u} = \frac{k(\mathbf{r}_{12}\Delta\mathbf{u})\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|^2}.$$

Ha $F_0 \neq 0$, de az elmozdulások merőlegesek $\mathbf{r}_{12}$-re, vagyis $\Delta\mathbf{u}\perp\mathbf{r}_{12}$, akkor az elsőrendű járulék

$$\mathbf{F}_{12} = \frac{F_0}{|\mathbf{r}_{12}|}\Delta\mathbf{u}\,.$$

5.3. Példa feladatok a rugós modell alkalmazására

5.3.1. Feszítetlen négyzetrács síkbeli rezgései elsőszomszéd kölcsönhatásokkal

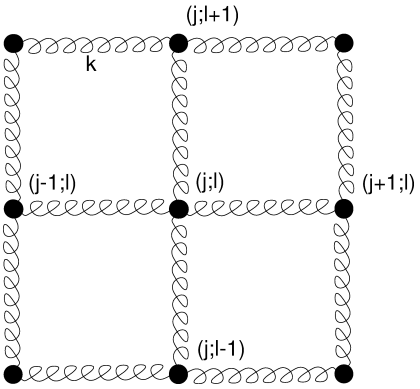
Tekintsük egy négyzetrács rugós modelljét elsőszomszéd kölcsönhatásokkal (ld. 5.2. ábra). A rácsban az elemi cella egy atomot tartalmaz.

Egy tetszőleges $\mathbf{R} = j\mathbf{a}_1 + l\mathbf{a}_2$ cellában elhelyezkedő atom mozgásegyenletei

$$m\ddot{u}_x(j,l) = k\left(u_x(j+1,l) - u_x(j,l)\right) + k\left(u_x(j-1,l) - u_x(j,l)\right)$$

$$m\ddot{u}_y(j,l) = k\left(u_y(j,l+1) - u_y(j,l)\right) + k\left(u_y(j,l-1) - u_y(j,l)\right)\,,$$

vagyis a négyzetrács szétcsatolódik merőlegesen futó egydimenziós láncokra. Ebben a modellben tehát nem kapnánk nyírásoknak ellenálló kétdimenziós kristályt.



5.2. ábra. Kétdimenziós négyzetrács.

5.3.2. Feszített négyzetrács síkbeli rezgései elsőszomszéd kölcsönhatásokkal

Feszített esetben a mozgásegyenletek

$$m\ddot{u}_x(j,l) = k\left(u_x(j+1,l)+u_x(j-1,l)-2u_x(j,l)\right)+\frac{F_0}{a}\left(u_x(j,l+1)+u_x(j,l-1)-2u_x(j,l)\right)$$

$$m\ddot{u}_y(j,l) = k\left(u_y(j,l+1)+u_y(j,l-1)-2u_y(j,l)\right)+\frac{F_0}{a}\left(u_y(j+1,l)+u_y(j-1,l)-2u_y(j,l)\right).$$

A megoldást

$$\begin{pmatrix} u_x(j,l,t) \\ u_y(j,l,t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{q}(j\mathbf{a}_1+l\mathbf{a}_2)-\omega(\mathbf{q})t)} = \begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix} e^{i(jq_xa+lq_ya-\omega(\mathbf{q})t)}$$

alakban keresve a mozgásegyenletek

$$-m\omega^2(\mathbf{q})\begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix} e^{i(jq_xa+lq_ya-\omega(\mathbf{q})t)} =$$

$$= \begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q})\left(k\left(e^{iq_xa}+e^{-iq_xa}-2\right)+\frac{F_0}{a}\left(e^{iq_ya}+e^{-iq_ya}-2\right)\right) \\ u_y(\mathbf{q})\left(k\left(e^{iq_ya}+e^{-iq_ya}-2\right)+\frac{F_0}{a}\left(e^{iq_xa}+e^{-iq_xa}-2\right)\right) \end{pmatrix} e^{i(jq_xa+lq_ya-\omega(\mathbf{q})t)}.$$

Tovább alakítva

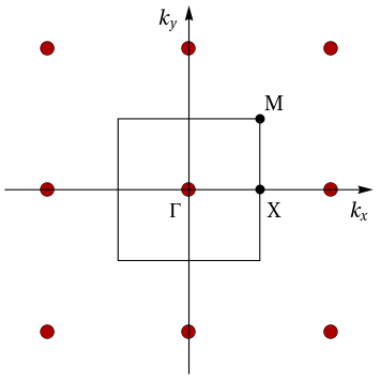
$$\omega^2(\mathbf{q})\begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_xa}{2}\right)+\frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_ya}{2}\right) & 0 \\ 0 & \frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_ya}{2}\right)+\frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_xa}{2}\right) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix}.$$

Innen kiszámíthatjuk a rácsrezgések diszperziós relációit (a frekvencia és a hullámszám közti összefüggés) és a polarizáció vektorokat.

$$\omega_1(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_xa}{2}\right)+\frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_ya}{2}\right)} \qquad \mathbf{e}_1(\mathbf{q}) = u_1(q)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\omega_2(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_y a}{2}\right) + \frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_x a}{2}\right)} \qquad \mathbf{e}_2(\mathbf{q}) = u_2(q)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

A képletekben $u_1(\mathbf{q})$ és $u_2(\mathbf{q})$ a rezgések amplitúdója. A diszperziós relációkat a Brillouin-zóna nevezetes vonalain (melyek magas szimmetriájú pontokat kötnek össze) szokás ábrázolni.



5.3. ábra. Kétdimenziós négyzetrács reciprokrácsa és első Brillouin-zónája.

A nevezetes pontok

$$\Gamma\left(0,0\right) \qquad X\left(\frac{\pi}{a},0\right) \qquad M\left(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right)$$

A $\Gamma - X$ vonalon $q_y = 0$ miatt

$\omega_1(q_x, q_y = 0) = \sqrt{\frac{4k}{m}}\left|\sin\frac{q_x a}{2}\right|$ longitudinális módus (a kitérés párhuzamos a hullámterjedéssel)

$\omega_2(q_x, q_y = 0) = \sqrt{\frac{4F_0}{ma}}\left|\sin\frac{q_x a}{2}\right|$ transzverzális módus (a kitérés merőleges a hullámterjedésre).

Az $X - M$ vonalon $q_x = \pi/a$ miatt

$$\omega_1(q_x = \pi/a, q_y) = \sqrt{\frac{4k}{m} + \frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_y a}{2}\right)}$$

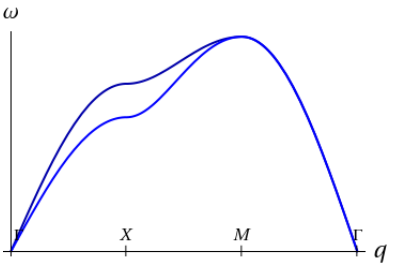
$$\omega_2(q_x = \pi/a, q_y) = \sqrt{\frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_y a}{2}\right) + \frac{4F_0}{ma}}.$$

Az $M - \Gamma$ vonalon $q_x = q_y$ miatt

$$\omega_1(q_x, q_y = q_x) = \sqrt{\frac{4k}{m} + \frac{4F_0}{ma}}\left|\sin\frac{q_x a}{2}\right|$$

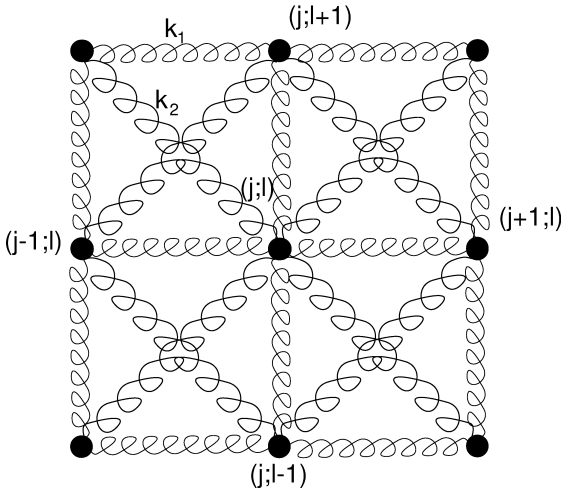
$$\omega_2(q_x, q_y = q_x) = \sqrt{\frac{4k}{m} + \frac{4F_0}{ma}}\left|\sin\frac{q_x a}{2}\right|$$

degeneráltak. A spektrumot a 5.4. ábrán ábrázoltuk.



5.4. ábra. Kétdimenziós négyzetrács rácsrezgéseinek diszperziós relációja a Brillouin-zóna nevezetes vonalai mentén.

5.3.3. Feszítetlen négyzetrács síkbeli rezgései másodszomszéd kölcsönhatásokkal



5.5. ábra. Kétdimenziós négyzetrács rugós modellje másodszomszéd kölcsönhatásokkal.

A mozgásegyenletek

$$m\ddot{u}_x = k_1 \left(u_x(j+1,l) + u_x(j-1,l) - 2u_x(j,l)\right) +$$

$$+\frac{k_2}{2}\left(u_x(j+1,l+1) + u_x(j+1,l-1) + u_x(j-1,l+1) + u_x(j-1,l-1) - 4u_x(j,l)\right) +$$

$$+\frac{k_2}{2}\left(u_y(j+1,l+1) + u_y(j-1,l-1) - u_y(j+1,l-1) - u_y(j-1,l+1)\right)$$

$$m\ddot{u}_y = k_1 \left(u_y(j,l+1) + u_y(j,l-1) - 2u_y(j,l)\right) +$$

$$+\frac{k_2}{2}\left(u_y(j+1,l+1) + u_y(j+1,l-1) + u_y(j-1,l+1) + u_y(j-1,l-1) - 4u_y(j,l)\right) +$$

$$+\frac{k_2}{2}\left(u_x(j+1,l+1)+u_x(j-1,l-1)-u_x(j+1,l-1)-u_x(j-1,l+1)\right).$$

A megfelelő próbafüggvény segítségével az

$$\omega^2(\mathbf{q})\begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x(\mathbf{q})+B(\mathbf{q}) & C(\mathbf{q}) \\ C(\mathbf{q}) & A_y(\mathbf{q})+B(\mathbf{q}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_x(\mathbf{q}) \\ u_y(\mathbf{q}) \end{pmatrix}$$

sajátérték egyenletre jutunk, ahol

$$A_x(\mathbf{q}) = \frac{4k_1}{m}\sin^2\frac{q_x a}{2} \qquad A_y = \frac{4k_1}{m}\sin^2\frac{q_y a}{2}$$

$$B(\mathbf{q}) = \frac{2k_2}{m}\left(\sin^2\frac{(q_x-q_y)a}{2}+\sin^2\frac{(q_x+q_y)a}{2}\right)$$

$$C(\mathbf{q}) = \frac{k_2}{m}\Big[\cos(q_x+q_y)a-\cos(q_x-q_y)a\Big].$$

Ezek alapján a diszperziós reláció két akusztikus ága

$$\omega_1^2(\mathbf{q}) = B(\mathbf{q})+\frac{A_x(\mathbf{q})+A_y(\mathbf{q})}{2}+\sqrt{\left(\frac{A_x(\mathbf{q})-A_y(\mathbf{q})}{2}\right)^2+C^2}$$

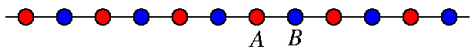
$$\omega_2^2(\mathbf{q}) = B(\mathbf{q})+\frac{A_x(\mathbf{q})+A_y(\mathbf{q})}{2}-\sqrt{\left(\frac{A_x(\mathbf{q})-A_y(\mathbf{q})}{2}\right)^2+C^2}.$$

5.3.4. Kétatomos elemi cellájú egydimenziós lánc

Tekintsünk egy egydimenziós végtelen láncot, melyet kétféle, felváltva elhelyezkedő atom épít fel (A-B-A-B-A-B) és atomok távolsága a. A láncban az első szomszédokat k_1, a másodszomszédokat k_2 rugóállandójú rugó köti össze. Az atomok tömege m_A és m_B.
a) Számoljuk ki a lánccal párhuzamos rácsrezgések $\omega(\mathbf{q})$ diszperziós relációját!
b) Adjuk meg $|\mathbf{q}| \to 0$ esetén az $\omega(\mathbf{q})$ aszimptotikus viselkedését! Mondjuk meg az összes fononág esetén, hogy akusztikus vagy optikai rezgést ír-e le!
Megoldás:
a)
A j. cellában található atomok kitérését $u_{A/B}(j)$-vel jelöljük. Az atomok mozgására az

$$m_A\partial_t^2 u_A(j) = k_1\left(u_B(j)+u_B(j-1)-2u_A(j)\right)+k_2(u_A(j+1)+u_A(j-1)-2u_A(j))$$

$$m_B\partial_t^2 u_B(j) = k_1\left(u_A(j)+u_A(j+1)-2u_B(j)\right)+k_2(u_B(j+1)+u_B(j-1)-2u_B(j))$$



5.6. ábra. Egydimenziós lánc kétatomos bázissal.

mozgásegyenleteket írhatjuk fel. Fontos, hogy a másodszomszéd kölcsönható atomok szomszédos elemi cellába esnek! A megoldásokat

$$u_{A/B}(j,t) = u_{A/B}(q)e^{iqja - i\omega(q)t}$$

alakban keressük. Ekkor a mozgásegyenletek az alábbi alakban írhatók.

$$-\omega(q)^2 m_A u_A(q) = k_1\left(u_B(q) + u_B(q)e^{-iqa} - 2u_A(q)\right) + k_2 u_A(q)(2\cos qa - 2)$$

$$-\omega(q)^2 m_B u_B(q) = k_1\left(u_A(q) + u_A(q)e^{iqa} - 2u_B(q)\right) + k_2 u_B(q)(2\cos qa - 2)$$

Legyen $v_{A/B}(q) = \sqrt{m_{A/B}}u_{A/B}(q)$! Ezekre a mozgásegyenleteket

$$-\omega(q)^2 v_A(q) = \frac{k_1}{\sqrt{m_A m_B}}\left(1 + e^{-iqa}\right)v_B(q) - \left(\frac{2k_1}{m_A} + \frac{2k_2}{m_A}(1-\cos qa)\right)v_A(q)$$

$$-\omega(q)^2 v_B(q) = \frac{k_1}{\sqrt{m_A m_B}}\left(1 + e^{iqa}\right)v_A(q) - \left(\frac{2k_1}{m_B} + \frac{2k_2}{m_B}(1-\cos qa)\right)v_B(q)$$

szerint írhatjuk át, amely egyenletek egy sajátérték problémát határoznak meg.

$$-\omega(q)^2\begin{pmatrix} v_A(q) \\ v_B(q)\end{pmatrix} = -\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{2k_1}{m_A} + \frac{2k_2}{m_A}(1-\cos qa) & -\frac{k_1}{\sqrt{m_A m_B}}\left(1+e^{-iqa}\right) \\ -\frac{k_1}{\sqrt{m_A m_B}}\left(1+e^{-iqa}\right) & \frac{2k_1}{m_B} + \frac{2k_2}{m_B}(1-\cos qa)\end{pmatrix}}_{\mathbf{D}(q)}\begin{pmatrix} v_A(q) \\ v_B(q)\end{pmatrix}$$

Jól látható, hogy a $D(q)$ dinamikus mátrix önadjungált. Vezessük be az alábbi jelöléseket!

$$\alpha(q) = \frac{k_1}{\sqrt{m_A m_B}}\left(1 + e^{-iqa}\right)$$

$$\beta_{A/B}(q) = \frac{2k_1}{m_{A/B}} + \frac{2k_2}{m_{A/B}}(1-\cos qa)$$

$$\mathbf{D}(q) = \begin{pmatrix} \beta_A(q) & -\alpha(q) \\ -\alpha(q)^* & \beta_B(q)\end{pmatrix}$$

A sajátérték probléma megoldásai

$$\omega(q)^2 = \frac{\beta_A + \beta_B}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\beta_A - \beta_B}{2}\right)^2 + |\alpha(q)|^2}$$

meghatározzák a diszperziós relációkat. A továbbiakban jelöljük $\omega_\pm$-val a megfelelő fonon ágakat.
b) Kis hullámszám értékekre

$$\alpha(q) \approx \frac{k_1}{\sqrt{m_A m_B}} \left(2 + iqa - \frac{(qa)^2}{2}\right)$$

$$\beta_{A/B}(q) \approx \frac{2k_1}{m_{A/B}} + \frac{k_2}{m_{A/B}}(qa)^2$$

A spektrumot szintén másodrendig fejtjük sorba a hullámszám szerint.

$$\omega_j^2(q) \approx \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}\right) k_1(1+j) + \frac{\left(\frac{1}{2m_A} + \frac{1}{2m_B}\right)^2 + j\left(\frac{1}{2m_A} - \frac{1}{2m_B}\right)^2 + \frac{3k_1}{4k_2 m_A m_B}}{\frac{m_A+m_B}{m_A m_B}} \frac{k_2}{2}(qa)^2$$

Látható, hogy $j = 1$ esetén $\omega_+(q=0) \neq 0$, így ez egy optikai fonon módust ír le. Ha $j = -1$, akkor $\omega_-(q=0) = 0$, tehát ez egy akusztikus fonon módus. Az akusztikus ág diszperziós relációja

$$\omega_-(q) = qa\sqrt{\frac{4k_2 + 3k_1}{8(m_A + m_B)}}$$

kis hullámszámok esetén, amelyről leolvasható a hangsebesség is.

$$c_h = a\sqrt{\frac{4k_2 + 3k_1}{8(m_A + m_B)}}$$

5.3.5. Különböző tömegű atomokból álló egydimenziós lánc

Egy egydimenziós lánc kétféle atomból áll, melyek tömege m_u és m_v. Az atomok közötti potenciált K rugóállandójú feszítetlen rugóval modellezzük.

a) Számold ki a láncirányú rezgések spektrumát.

b) Hogyan mozognak az atomok a Brillouin-zóna közepén és szélén lévő gerjesztések esetén?

c) Legyen a kétféle atom Na és Cl, a rácsállandó a NaCl kristályban mérhető $a = 5,626$ Å, és legyen a legmagasabb enerigájú optikai fonon energiája 30 meV. Mekkora ekkor K? Add meg eV/Å^2 atomi egységekben.

d) Tegyük fel, hogy a lánc teljes fononspektrumát ki szeretnénk mérni inelasztikus neutronszórás segítségével. A bejövő és a szórt neutronok is haladjanak a lánccal párhuzamosan. A méréshez 0-tól $E_{\max}$-ig terjedő energiájú neutronokat használunk. Legalább mekkora legyen $E_{\max}$ (meV-ben), hogy a teljes fononspektrumot ki tudjuk mérni a neutronok segítségével?

Megoldás:

a) A láncirányú rezgéseket leíró egyenletek

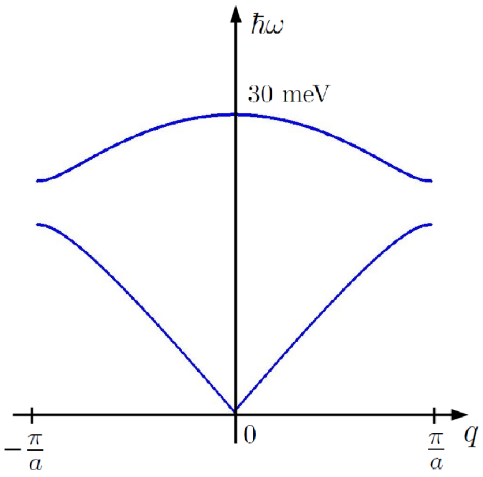
$$\begin{pmatrix} m_u\,\omega^2\,u(q) \\ m_v\,\omega^2\,v(q) \end{pmatrix} = K \begin{pmatrix} 2 & -(1+e^{-iqa}) \\ -(1+e^{iqa}) & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix}, \tag{5.3}$$

ahol a kétféle atom elmozdulásait jelöljük $u(q)$-val és $v(q)$-val. Az ebből adódó energiaspektrum

$$\omega_{\pm}^2 = K\left(\frac{1}{m_u}+\frac{1}{m_v} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m_u}-\frac{1}{m_v}\right)^2 + \frac{|1+e^{iqa}|^2}{m_u m_v}}\right) \tag{5.4}$$

$$= K\left(\frac{1}{m_u}+\frac{1}{m_v}\right)\left(1 \pm \sqrt{1-\frac{4m_u m_v}{(m_u+m_v)^2}\sin^2(qa/2)}\right), \tag{5.5}$$

amelynek akusztikus és optikai ága a 5.7. ábrán látható.



5.7. ábra. Az egydimenziós lánc spektruma Na és Cl atomokkal.

b) A Brillouin-zóna közepén ($q = 0$) az akusztikus fononág 0 enerigával rendelkezik, és a hozzá tartozó módus koordinátái $u = v = 1$. Ez a módus az összes rácsatom együttes eltolásának felel meg, amelyhez nyilvánvalóan 0 energia tartozik. Az optikai ágban $\omega(q=0) = \sqrt{K(2/m_u + 2/m_v)}$, és a rezgési módus $u = m_v, v = -m_u$, vagyis a cellák kétféle atomja egymással ellentétes irányban rezeg úgy, hogy a cella tömegközéppontja mozdulatlan marad.

A Brillouin-zóna széleinél ($q = \pm\pi/a$) lévő két módus energiája $\omega = \sqrt{2K/m_u}$ és $\omega = \sqrt{2K/m_v}$. (Ez könnyen leolvasható a (5.3) egyenletről, mert ebben az esetben a dinamikus mátrix diagonálissá válik.) A két módusban csak az egyik vagy a másik típusú atomok végeznek mozgást, a szomszédos cellákban ellentétes irányban.

c) A Na és Cl tömegei $m_u = 23\,[\text{Amu}]$, és $m_v = 35\,[\text{Amu}]$, ahol $1[\text{Amu}] = 1\,\text{g}\,/6\times10^{23}$, az atomi tömegegység. A legmagasabb energiájú fonon az optikai ágban található, $\omega(q = 0) = \sqrt{K(2/m_u + 2/m_v)}$. Ebből megkapjuk a rugóállandó értékét, $K \approx 1.49\,\text{eV/Å}^2$.

d) A kristály diszkrét eltolási szimmetriájából kváziimpulzus-megmaradás következik: a rendszerben lezajló tetszőleges folyamatban az impulzusoknak reciprokrács-vektor erejéig meg kell maradnia. Két feltételt kapunk, amelyek meghatározzák, hogy milyen energiájú neutron kelthet $\hbar\omega$ energiájú fonont

$$k_i - k_f = q + n\frac{2\pi}{a}, \quad \text{ahol } n \in \mathbb{Z} \tag{5.6}$$

$$\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \hbar\omega(q), \tag{5.7}$$

ahol k_i illetve k_f a bejövő és a kimenő neutron hullámszáma, m a tömege és q a keltett fonon impulzusa. Ez az egyenletrendszer csak numerikusan oldható meg. Vizsgáljuk meg a legnagyobb frekvenciájú optikai fonont ($q = 0$). A két egyenletből k_i meghatározható

$$k_i = n\,\frac{\pi}{a} + \frac{ma}{2\pi\hbar}\,\frac{\omega}{n}. \tag{5.8}$$

A legmagasabb frekvenciájú fonont gerjeszteni képes neutronok közül az $n = 3$-as értékhez tartozónak van a legkisebb energiája,

$$\left.\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}\right|_{n=3} \approx 30,5\,\text{meV}. \tag{5.9}$$

5.3.6. Szennyezők hatása a rácsrezgésekre

Egy egydimenizós kristály egyforma m tömegű atomokból áll, egyetlen szennyezőt kivéve, amelynek tömege M. (Ez lehet ugyanannak az elemnek egy izotópja is.) Az atomok közötti kölcsönhatást K rugóállandójú rugókkal modellezzük. m/M bizonyos arányánál egy lokalizált fononmódus is megjelenhet a szennyező atom körül.

a) M mekkora értékénél létezhet a lokalizált módus?

b) Milyen a térbeli viselkedése és az energiája? Mi történik a módussal, mikor M-et olyan tartományba visszük, amelyben a lokalizált módus már nem létezik?

Megoldás:

A láncirányú rezgéseket leíró egyenletek

$$m\,\ddot{u}_n = K(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n), \quad n \neq 0\text{-ra, és} \tag{5.10}$$

$$M\,\ddot{u}_0 = K(u_1 + u_{-1} - 2u_0). \tag{5.11}$$

A lokalizált módus leírásához feltételeznünk kell, hogy a hullámszámvektornak képzetes komponense is van,

$$u_n(t) = u(q)e^{iq|n|a}e^{-i\omega t}, \text{ ahol } q = i\alpha + \beta. \tag{5.12}$$

Ahhoz, hogy ne kapjunk végtelenben felrobbanó megoldást, $\alpha > 0$-t kell vennünk. Behelyettesítve a (5.12) feltevést az $n \neq 0$ egyenletekbe megkapjuk a fononfrekvencia q-függésének egyenletét

$$\omega^2 = \frac{K}{m}\left(2 - e^{iqa} - e^{-iqa}\right) = \frac{K}{m}\left(2 - e^{-\alpha a}e^{i\beta a} - e^{\alpha a}e^{-i\beta a}\right). \tag{5.13}$$

Mivel ω^2 valós és pozitív kell legyen, az $e^{i\beta a}$ fázisok csak -1 értéket vehetnek fel,

$$\omega^2 = \frac{2K}{m}\left(1 + \cosh(\alpha a)\right). \tag{5.14}$$

A (5.12) megoldásnak azonban még ki kell elégítenie a szennyező helyén felírt egyenletet,

$$\omega^2 = \frac{K}{M}\left(2 - 2e^{iqa}\right) = \frac{2K}{M}\left(1 + e^{-\alpha a}\right). \tag{5.15}$$

amely egyetlen α értékre fog csak teljesülni, így csak egyetlen lokalizált állapot lesz. A (5.14) és (5.15) egyenletek egyenlőségéből kapjuk, a tömegek arányai és az α paraméter közötti következő összefüggést

$$\frac{M}{m} = \frac{2}{e^{\alpha a} + 1}. \tag{5.16}$$

A jobb oldalon álló kifejezés minden α esetén kisebb 1-nél. Ez azt jelenti, hogy a kötött állapot létezésének feltétele $M < m$, vagyis a szennyezőnek kisebb tömegűnek kell lennie, mint a láncot alkotó többi atomnak. Felhasználva az előbbi összefüggést, kapjuk az állapot energiáját és térkonfigurációját megadó egyenleteket

$$\omega = \sqrt{4K\frac{m/M}{2m - M}}, \tag{5.17}$$

$$u_n(t) = (-1)^{|n|}\left(\frac{M}{2m - M}\right)^{|n|}e^{-i\omega t}. \tag{5.18}$$

Az $M \to m$ határesetben a kötött módus az uniform lánc $q = \pi/a$ hullámszámhoz tartozó rácsrezgésébe megy át, energiája $\omega \to 2\sqrt{K/M}$-hez tart.

5.3.7. Rácsrezgések jele a szórási képben

Tekintsünk egy egydimenziós lineáris láncot a rácsállandóval. Tételezzük fel, hogy egy transzverzális fononmódus propagál benne u_0 amplitudóval és $q = \pi/a$ hullámszámmal. Határozzuk meg a Röntgen szórási intenzitást a hullámszámváltozás függvényében! (A lánc rácshelyenként egy atomot tartalmaz f atomi szórástényezővel.)

a) Feledkezzünk meg a rezgés időfüggéséről, azaz rögzítsük az atomokat az $u_y(n) = u_0 e^{iqna}$ kitéréshez tartozó pozícióban. Rajzoljuk fel a megadott hullámszámhoz tartozó atomi kitéréseket! Számoljuk ki a szórás intenzitását a hullámszámváltozás függvényében. Ábrázoljuk az intenzitást Δk_x függvényében! Miben változott a fonon hatására (sztatikus kitérés)? Számoljuk ki az intenzitást kis rácsrezgési amplitudó határesetben $\Delta k_y u_0 \ll 1$!

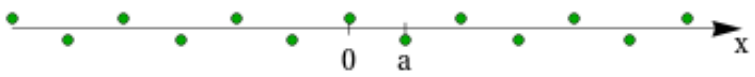
b) Hogyan változik az intenzitás az atomok rezgésének időfüggését figyelembe véve? Az előző részfeladatban u_0 helyére írjunk be $u_0 \cos\omega(q)t$-t, és átlagold ki az intenzitást! Határozd meg a kis és nagy rácsrezgési amplitúdó határesetekben az intenzitást! Mi az oka annak, hogy lényegesen más eredményt látunk, mint a Debye-Waller faktor számolásánál?

Segítség:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}x \cos(\alpha \cos x) = 2\pi J_0(\alpha) \qquad \text{Bessel-függvény}$$

$$J_0(\alpha \ll 1) = 1 - \frac{\alpha^2}{4} \qquad J_0(\alpha \gg 1) = \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha}} \sin\left(\alpha - \frac{\pi}{4}\right)$$

Megoldás:
a)



5.8. ábra. Atomok kitérése sztatikus $q = \pi/a$ módus esetén.

Sztatikus kitérés esetén az elemi cella kétatomossá válik. Emiatt az amplitúdóban

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \int \rho(x,y) e^{i(\Delta k_x x + \Delta k_y y)} \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \sum_n e^{i\Delta k_x 2na} \int_{\text{elemi cella}} \rho(x,y) e^{i(\Delta k_x x + \Delta k_y y)} \mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

az összegzés az új rácsvektorokon fut végig $R_n = 2na$ és az integrálás is az új, nagyobb elemi cellára vonatkozik. Az elemi cella két atomjának atomi szórási tényezője f, emiatt

$$A(\Delta\mathbf{k}) = \sum_n e^{i\Delta k_x 2na} f\left(e^{i\Delta k_y u_0} + e^{-i\Delta k_y u_0} e^{i\Delta k_x a}\right).$$

A rácsösszegben

$$\sum_n e^{i\Delta k_x 2na} = N \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \qquad\qquad G = \frac{m\pi}{a} \qquad m \in \mathbb{Z}$$

N az új elemi cellák száma.

$$A(\Delta\mathbf{k}) = N \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} f \left(e^{i\Delta k_y u_0} + e^{-i\Delta k_y u_0} e^{i\Delta k_x a} \right)$$

$$I(\Delta\mathbf{k}) = |A(\Delta\mathbf{k})|^2 = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \left(1 + \cos(2\Delta k_y u_0 - \Delta k_x a)\right)$$

$$I(\Delta\mathbf{k}) = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \left(1 + \cos(2\Delta k_y u_0)\cos(\Delta k_x a)\right),$$

ahol $\cos(\Delta k_x a)$ valójában a ± 1 értékeket veheti fel a $\delta_{\Delta k_x, \mathbf{G}}$ feltétel miatt.

Az intenzitásban korábban, a fonon módus nélkül csak $2m\pi/a$-nál voltak Bragg-csúcsok. Itt azonban megjelentek páratlan $(2m+1)\pi/a$ helyen is Bragg-csúcsok.
b) Időfüggés figyelembe vételével

$$I(\Delta\mathbf{k}, t) = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \left(1 + \cos(2\Delta k_y u_0 \cos(\omega t))(-1)^m\right),$$

ahol $m = Ga/\pi$ és egy teljes periódusra átlagolva

$$\bar{I}(\Delta\mathbf{k}) = \frac{1}{T}\int_0^T \mathrm{d}t I(\Delta\mathbf{k}, t) = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \frac{1}{T}\int_0^T \mathrm{d}t \left(1 + \cos(2\Delta k_y u_0 \cos(\omega t))(-1)^m\right)$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

Az integrálás elvégezhető és megjelenik a 0. elsőfajú Bessel-függvény.

$$\bar{I}(\Delta\mathbf{k}) = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \left(1 + J_0(2\Delta k_y u_0)(-1)^m\right)$$

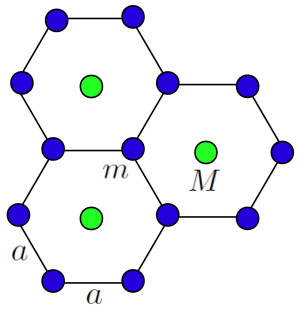
Nagy rezgési amplitúdó határesetben

$$\bar{I}(\Delta\mathbf{k}) = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \left(1 + \sqrt{\frac{1}{\pi \Delta k_y u_0}} \sin\left(2\Delta k_y u_0 - \frac{\pi}{4}\right)(-1)^m\right)$$

Kis rezgési amplitúdó határesetben

$$\bar{I}(\Delta\mathbf{k}) = 2N^2 f^2 \sum_G \delta_{\Delta k_x, G} \left(1 + (1 - (\Delta k_y u_0)^2)(-1)^m\right)$$

A Debye-Waller számolással ellentétben itt x irányban nem vettünk figyelembe rendezetlenséget, ezért a szórási képben csak koherens járulék jelenik meg.



5.9. ábra. Kristályrács m és M tömegű atomokkal.

5.3.8. Hatszögrács rácsrezgései

Vizsgáld meg a 5.9. ábrán látható rács rácssíkra merőleges rezgéseit olyan megfeszített rugós modellben, melyben minden elsőszomszéd atomot azonos rugóállandójú rugó köt össze.

a) Határozd meg a bázist. Hány atomot tartalmaz az elemi cella?

b) Számold ki a $\mathbf{q} = 0$ módusok frekvenciáit, és az elmozdulásokat abban a módusban, melyben az M tömegű atomok elmozdulása nulla.

c) Mi történik az $m = M$ határesetben?

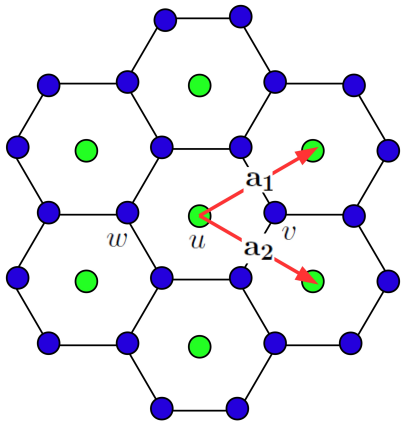
Megoldás:
a) Az elemi cella három atomot tartalmaz, ezek síkra merőleges elmozdulásait u, v és w jelöli (5.10. ábra). Az elemi rácsvektorok:

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}a \\ \frac{\sqrt{3}}{2}a \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}a \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}a \end{pmatrix},$$

ahol a az m tömegű atomok távolsága.
b) A rácsatomok között ható erőt jelöljük F_0-lal, és legyen $k \equiv F_0/a$. A mozgásegyenletek az $\mathbf{R} = j\mathbf{a}_1 + l\mathbf{a}_2$ rácsvektorhoz tartozó elemi cellában:

$$M\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}u(j,l) = k\left(v(j,l) + v(j-1,l) + v(j,l-1) + w(j,l) + w(j+1,l) + w(j,l+1) - 6u(j,l)\right)$$
$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}v(j,l) = k\left(u(j,l) + u(j+1,l) + u(j,l+1) + w(j+1,l+1) + w(j+1,l) + w(j,l+1) - 6v(j,l)\right)$$
$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}w(j,l) = k\left(u(j,l) + u(j-1,l) + u(j,l-1) + v(j-1,l-1) + v(j-1,l) + v(j,l-1) - 6w(j,l)\right)$$

Áttérve Fourier-komponensekre



5.10. ábra. Az elemi rácsvektorok és az u, v és w elmozdulások.

$$\begin{pmatrix} u(j,l) \\ v(j,l) \\ w(j,l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(\mathbf{q}) \\ v(\mathbf{q}) \\ w(\mathbf{q}) \end{pmatrix} e^{i(jq_1+lq_2-\omega(\mathbf{q})t)}, \text{ ahol } \mathbf{q} = \frac{q_1\mathbf{b}_1 + q_2\mathbf{b}_2}{2\pi}.$$

A mozgásegyenletek ekkor szétcsatolhatóak a különböző impulzus-komponenesek szerint

$$-\omega^2(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} Mu(\mathbf{q}) \\ mv(\mathbf{q}) \\ mw(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} -6 & 1+e^{-iq_1}+e^{-iq_2} & 1+e^{iq_1}+e^{iq_2} \\ 1+e^{iq_1}+e^{iq_2} & -6 & e^{iq_1}+e^{iq_2}+e^{i(q_1+q_2)} \\ 1+e^{-iq_1}+e^{-iq_2} & e^{-iq_1}+e^{-iq_2}+e^{-i(q_1+q_2)} & -6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{q}) \\ v(\mathbf{q}) \\ w(\mathbf{q}) \end{pmatrix}$$

A $\mathbf{q} \to 0$ határeset vizsgálatához vezessük be az $u' = \sqrt{M}u$, $v' = \sqrt{m}v$, $w' = \sqrt{m}w$ és $\alpha = \sqrt{m/M}$ változókat. Az egyenletek ekkor a következő sajátérték-egyenletre vezetnek

$$\omega^2(\mathbf{0}) \begin{pmatrix} u'(\mathbf{0}) \\ v'(\mathbf{0}) \\ w'(\mathbf{0}) \end{pmatrix} = \frac{3k}{m} \begin{pmatrix} 2\alpha^2 & -\alpha & -\alpha \\ -\alpha & 2 & -1 \\ -\alpha & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u'(\mathbf{0}) \\ v'(\mathbf{0}) \\ w'(\mathbf{0}) \end{pmatrix},$$

amelynek megoldásai

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 3, \\ \lambda_2 &= 2\alpha^2 + 1, \\ \lambda_3 &= 0. \end{aligned}$$

Az első sajátértékhez tartozó sajátvektor, $\mathbf{e}_1 = (0, 1, -1)^T$, a mátrix speciális szimmetriája miatt leolvasható annak diagonalizálása nélkül. Ebben a rezgési módusban az M tömegű atomok helyben maradnak, és csak az m tömegűek végeznek rezgőmozgást. A

0 sajátérték megjelenése természetes, hiszen pontosan egy akusztikus fononágnak kell lennie a rendszerben a síkra merőleges kitérések alterén.

c) Az $M \to m$ határesetben $\lambda_2 \to \lambda_1$, tehát látszólag két optikai és egy akusztikus fononunk van. Viszont ebben a határesetben a rács szimmetriája magasabb, így az elemi cella kisebb, és csak egyetlen atom tartozik hozzá. Ezek alapján összesen egy akusztikus fononágat várunk. A látszólagos ellentmondás feloldása az, hogy a magasabb szimmetriájú rács nagyobb Brillouin-zónájában a $\lambda_1 = 3$ és $\lambda_2 = 3$-hoz tartozó rezgések q hullámszáma már nem 0. Mivel a magasabb szimmetriájú rácsban az u, v és w atomok különböző elemi cellához tartoznak, csak $\mathbf{e}_3$ lesz akusztikus módus.

5.3.9. Spinell szerkezetű kristály

Hány akusztikus és hány optikai fonon ágat várhatunk egy köbös spinell szerkezetű kristály esetén?

Megoldás:

A köbös spinell szerkezetű kristály összegképlete AB_2O_4 alakban írható, vagyis a bázisa 7 atomot tartalmaz. A rács háromdimenziós, ezért összesen 3 akusztikus módust és $3 \cdot (7 - 1) = 18$ optikai fononmódust várunk.

5.4. Házi feladatok

9. házi feladat

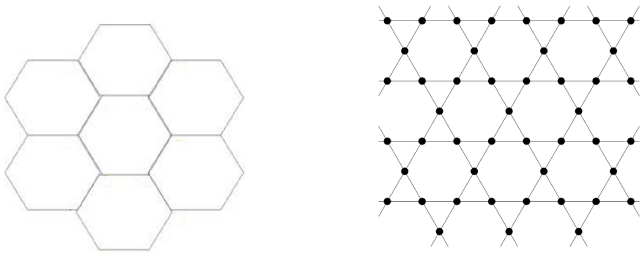
Vizsgáljuk a hatszöges grafitsík síkra merõleges kitéréseihez tartozó fononmódusait a megfeszített rugós modellben.

a) Határozd meg a bázist és az elemi rácsvektorokat! Hány atomból áll az elemi cella? Számítsd ki a reciprokrács elemi rácsvektorait! Hány darab és milyen fononmódus(ok) van(nak) a rendszerben?

b) Írd fel a bázisatomok mozgásegyenletét Fourier-térben általános $\mathbf{q}$ hullámszámvektorra!

c) Határozd meg a fononmódusok frekvenciáit és a hozzájuk tartozó atomi elmozdulás vektorokat $\mathbf{q} = 0$-ra!

d) Mutasd meg, hogy létezik olyan fononmódus, ahol csak az atomok fele végez rezgést! Mekkora az ehhez tartozó fononfrekvencia és mekkorák az egyes atomok elmozdulásvektorai?



5.11. ábra. Grafit sík és Kagome rács.

10. házi feladat

Adott egy szabályos háromszög csúcsain három egyforma m tömegû atom, melyeket k rugóállandójú, F_0 elõfeszítettségû rugók kötnek össze. Számold ki a síkra merõleges rezgések sajátfrekvenciáját! Ezek után tekintsd a fenti ábrán látható Kagome rácsot, síkra merõleges kitérések esetén számítsd ki a fonon spektrumot q$\rightarrow$0 esetben! Milyen hasonlóságot veszel észre a háromszög és a Kagome rács rezgései között?

11. házi feladat

Egy egydimenziós lánc felváltva elhelyezkedõ A és B típusú atomokból áll, melyeket k_1 rugóállandójú, F_0 elõfeszítésû rugó köt össze. Ezenkívûl minden legközelebbi B típusú atom pár másodszomszéd k_2 rugóállandójú rugóval van összecsatolva.

a) Írd fel a mozgásegyenleteket, a láncirányba, illetve az arra merõleges irányban.

b) Határozd meg a diszperziós relációt $k_2 = k_1/2$ esetén. Hogyan értelmezhetõ egyszerûen a láncra merõleges esetben kapott eredmény?

12. házi feladat

Határozzuk meg, hogy az alábbi integrálok közül melyek divergensek a $d = 1, 2, 3$ esetekben. A képletben $\beta > 0$.

$$\int_0^{\omega_D} \omega^{d-2} \mathrm{d}\omega \qquad \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^{d-2}}{e^{\beta\omega} - 1} \mathrm{d}\omega.$$

6. fejezet

Fononok állapotsűrűsége

Egy egydimenziós rendszerben egyetlen fononmódus helyfüggése

$$u(n) = u(q)e^{iqna}$$

szerint írható. Egy $L = Na$ hosszúságú mintában a periodikus határfeltétel szerint

$$u(0) = u(N)$$

kell teljesüljön minden módusra, vagyis $qNa = qL = 2\pi m$ valamilyen $m \in \mathbb{Z}$ számmal. Ezek szerint q nem folytonos változó, hanem csak diszkrét

$$q = \frac{2\pi}{L}m \qquad m \in \mathbb{Z}$$

értékeket vehet fel. Így a hullámszámtérbeli állapotsűrűség (vagy másképpen kifejezve az egységnyi nagyságú hullámszám tartományban megtalálható állapotok száma)

$$N(q) = \frac{L}{2\pi}.$$

Egy d dimenziós rendszerben a fononok hullámszámtérbeli állapotsűrűsége

$$N(\mathbf{q}) = \frac{V_d}{(2\pi)^d},$$

ahol V_d a minta térfogata.

A frekvencia függő állapotszámot

$$\Omega(\omega) = \sum_{\mathbf{q}s} \Theta(\omega - \omega_s(\mathbf{q}))$$

szerint definiálhatjuk, ahol $\omega_s(\mathbf{q})$ az s-sel indexelt diszperziós ág diszperziós relációja és Θ a Heaviside-függvény. Az $\Omega(\omega)$ állapotszám a rendszer azon rezgési módusainak a száma, melyeknek a frekvenciája kisebb, mint ω. Az állapotsűrűség

$$G(\omega) = \frac{\mathrm{d}\Omega(\omega)}{\mathrm{d}\omega} = \sum_{\mathbf{q}s} \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{q})) = \frac{V_d}{(2\pi)^d} \sum_s \int \mathrm{d}^d q \, \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{q}))$$

alakban írható. Egy $G(\omega)$ állapotsűrűségű rendszerben az ω és $\omega + d\omega$ frekvenciák közé eső módusok száma éppen $G(\omega)d\omega$.

Ha az egyik diszperziós ág izotróp, akkor alkalmazható a következő egyszerűbb módszer a hozzá tartozó állapotsűrűség meghatározására.

$$G(\omega)\mathrm{d}\omega = N(\mathbf{q})\mathrm{d}^d q = \frac{V_d}{(2\pi)^d} K_d q^{d-1} \mathrm{d}q \qquad K_d = \begin{cases} 2 & d = 1 \\ 2\pi & d = 2 \\ 4\pi & d = 3 \end{cases}$$

$$G(\omega) = \frac{V_d}{(2\pi)^d} K_d q(\omega)^{d-1} \left| \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}q} \right|^{-1}$$

Így egy dimenzióban (izotróp diszperzió esetén, vagyis amikor $\omega(q) = \omega(-q)$, egy L hosszú mintában)

$$G(\omega) = \frac{L}{\pi} \left| \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}q} \right|^{-1},$$

két dimenzióban (izotróp diszperzió esetén egy A területű mintában)

$$G(\omega) = \frac{A}{2\pi} q(\omega) \left| \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}q} \right|^{-1}$$

és három dimenzióban (izotróp diszperzió esetén egy V térfogatú mintában)

$$G(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} q^2(\omega) \left| \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}q} \right|^{-1}.$$

A frekvencia függő állapotsűrűség a termodinamikai mennyiségek meghatározásában játszik fontos szerepet.

6.1. Debye-modell

A Debye-modell szerint a rácsrezgések diszperziós relációja

$$\omega(\mathbf{q}) = c|\mathbf{q}|$$

alakban írható valamilyen konstans c hangsebességgel egy ω_{D} Debye-frekvenciáig. Ez egyébként az akusztikus ágak jó közelítése kis hullámszámok esetén. Az állapotsűrűség ebben a modellben egy dimenzióban

$$G(\omega) = \frac{L}{\pi c}$$

konstans, a frekvenciától független, két dimenzióban

$$G(\omega) = \frac{A}{2\pi}\frac{q(\omega)}{c} = \frac{A}{2\pi c^2}\omega$$

lineárisan függ a frekvenciától és három dimenzióban

$$G(\omega) = \frac{V}{2\pi^2}\frac{q^2(\omega)}{c} = \frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c^3}$$

négyzetesen függ a frekvenciától.

Az ω_{D} Debye-frekvenciát úgy szoktuk meghatározni, hogy az összes módus száma megegyezzen az elemi cellák számával.

6.2. Állapotsűrűség feszített négyzetrács esetén

Korábban kiszámoltuk a diszperziós relációkat:

$$\omega_1(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_x a}{2}\right) + \frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_y a}{2}\right)}$$

$$\omega_2(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{q_y a}{2}\right) + \frac{4F_0}{ma}\sin^2\left(\frac{q_x a}{2}\right)}.$$

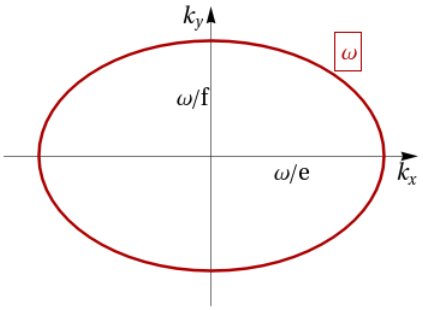
Alacsony hőmérsékleten csak a kis frekvenciájú állapotok lesznek érdekesek, melyek egyben a kis hullámszámú állapotok is.

$$\omega_1^2(\mathbf{q}) \approx \frac{4k}{m}\left(\frac{q_x a}{2}\right)^2 + \frac{4F_0}{ma}\left(\frac{q_y a}{2}\right)^2 = e^2 q_x^2 + f^2 q_y^2$$

$$\omega_2^2(\mathbf{q}) \approx \frac{4k}{m}\left(\frac{q_y a}{2}\right)^2 + \frac{4F_0}{ma}\left(\frac{q_x a}{2}\right)^2 = f^2 q_x^2 + e^2 q_y^2$$

$$e = \sqrt{\frac{k}{m}}a \qquad f = \sqrt{\frac{F_0}{ma}}a$$

A diszperziós relációk kis hullámszámokra sem izotrópok.



6.1. ábra. Konstans frekvenciájú felület a hullámszám térben anizotróp.

Az azonos frekvenciájú állapotok a hullámszám térben egy ellipszisen helyezkednek el, így az első diszperziós relációból származó állapotszám az ellipszis területe alapján (az ellipszis féltengelyeinek hossza ω/e és ω/f)

$$\Omega_1(\omega) = \frac{A}{4\pi^2}\pi\frac{\omega}{e}\frac{\omega}{f} = \frac{A}{4\pi}\frac{\omega^2}{ef}$$

lesz, az állapotsűrűség pedig

$$G_1(\omega) = \frac{\mathrm{d}\Omega_1(\omega)}{\mathrm{d}\omega} = \frac{A}{2\pi}\frac{\omega}{ef}.$$

A kapott állapotsűrűség olyan, mintha az izotróp rendszer esetén kapott állapotsűrűség képletében a hangsebesség helyébe e és f mértani közepét helyettesítenénk. A második ágból származó állapotsűrűség megegyezik az elsőből származóval, mert az első diszperziós ágat elforgatva kapjuk a másodikat (ez a rács C_4 szimmetriájából is következik).

$$G_2(\omega) = \frac{A}{2\pi}\frac{\omega}{ef}$$

A teljes rendszer állapotsűrűsége

$$G(\omega) = \frac{A}{\pi}\sqrt{\frac{m^2}{kF_0a^3}}\,\omega\,.$$

6.3. Példa feladatok állapotsűrűség számítására

6.3.1. Debye-modell jégben

Jégben a hangsebesség 4000 m/s (longitudinális módus). A rácsállandó $a \approx 3 \cdot 10^{-10}$ m. Mekkora az ehhez tartozó Debye-hőmérséklet? ($k_\mathrm{B} = 1.38{\cdot}10^{-23}$J/K, $h = 6.626{\cdot}10^{-34}$

Js)
Megoldás:
A jég háromdimenziós kristály, ezért 3 akusztikus fonon módus van a rendszerben. Ezek közül a longitudinális módus diszperziós relációja a Debye-modellben

$$\omega(\mathbf{k}) = c_{\mathrm{h}} k,$$

ahol c_{h} a hangsebesség. Három dimenzióban az állapotsűrűség erre az akusztikus ágra

$$G(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 c_{\mathrm{h}}^3} \omega^2.$$

Az ω_{D} Debye-frekvenciát az alábbi összefüggés definiálja.

$$N = \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} \mathrm{d}\omega G(\omega),$$

ahol $N = V/a^3$ az elemi cellák száma. Az integrálást elvégezve

$$\omega_{\mathrm{D}} = \left(6\pi^2\right)^{1/3} \frac{c_{\mathrm{h}}}{a},$$

melynek segítségével a Θ_{D} Debye-hőmérséklet

$$\Theta_{\mathrm{D}} = \frac{\hbar\omega_{\mathrm{D}}}{k_{\mathrm{B}}} = \left(6\pi^2\right)^{1/3} \frac{\hbar c_{\mathrm{h}}}{k_{\mathrm{B}} a} = 397,4\, K.$$

6.3.2. Debye-modell hiperköbös rácsban

Tekintsünk egy d-dimenziós hiperköbös kristályt, n db atommal az elemi cellában.

a) Hány akusztikus és hány optikai fononág van a rendszerben?

b) Határozd meg a fonon állapotsűrűséget a Debye-modellben!

Megoldás:
a) Ha n atom van az elemi cellában, akkor egy d-dimenziós kristályban d db akusztikus és $d(n-1)$ db optikai fononág van. A $\mathbf{q} = 0$ hullámszámú rácsrezgéseknél minden cellában egyformán rezegnek az atomok. Az akusztikus ágak esetén, amelyekben $\omega(\mathbf{q} = 0) = 0$, a $\mathbf{q} = 0$ hullámszámú rácsrezgések olyan rezgési módusoknak felelnek meg, amelyekben a cella minden atomja együtt mozog. Optikai rácsrezgések esetén, amelyekben $(\omega(\mathbf{q} = 0) \neq 0)$, a cella atomjai egymáshoz képest rezegnek úgy, hogy $\mathbf{q} = 0$-ra a cella tömegközéppontja mozdulatlan.
b) A Debye-modell csak az akusztikus fononokat veszi figyelembe. Egy hiperköbös kristályban a d db akusztikus fononág mindegyikéhez ugyanolyan hangsebesség tartozik:

$$\omega(\mathbf{q}) = c\,|\mathbf{q}| = cq, \text{ ha } cq < \omega_{\mathrm{D}}.$$

Ha a d-dimenziós egységgömb felszínét K_d-vel, a rendszer térfogatát pedig V_d-vel jelöljük, az akusztikus fononok $g(\omega)$ állapotsűrűségére teljesül a következő egyenlet:

$$\int \mathrm{d}\omega\, G(\omega) = d \sum_{\mathbf{q}:\, cq<\omega_\mathrm{D}} = d\, V_d \int_{\omega(\mathbf{q})<\omega_\mathrm{D}} \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} = d\, V_d \int_{\omega(q)<\omega_\mathrm{D}} \mathrm{d}q\, K_d\, \frac{q^{d-1}}{(2\pi)^d},$$

amelyből

$$G(\omega) = \frac{dV_dK_d}{(2\pi)^d}\, q^{d-1}\, \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\omega} = \frac{dV_dK_d}{(2\pi)^d}\, \frac{\omega^{d-1}}{c^d}.$$

Speciálisan

$$\begin{aligned} G(\omega)\big|_{d=1} &= \frac{L}{\pi c}, \\ G(\omega)\big|_{d=2} &= \frac{A\omega}{\pi c^2}, \\ G(\omega)\big|_{d=3} &= \frac{3}{2\pi^2}\frac{V\omega^2}{c^3}. \end{aligned}$$

6.3.3. Optikai fononok állapotsűrűsége

Egy egydimenziós a rácsállandójú kristályban az egyik optikai fononág diszperziós relációja közelítőleg $\omega = \sqrt{c^2k^2 + \omega_0^2}$, ahol c konstans, ω_0 pedig a fononfrekvencia a sáv alján.

a) Rajzoljuk fel a diszperziós relációt! Írjuk fel ezen optikai fononok $g(\omega)$ állapotsűrűségét!

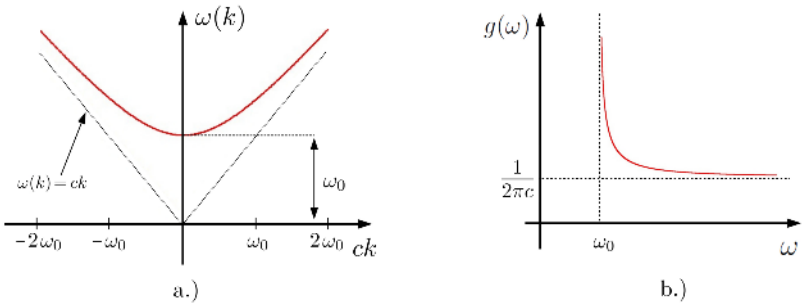
b) Mekkora a fononok $\partial\omega/\partial\mathbf{k}$ csoportsebessége? Nézzük meg a kis és nagy k-ra vonatkozó határesetet! Mi c fizikai jelentése, és mekkora az effektív tömeg a sáv alján?

Megoldás:
A 6.2. ábra a) részén a diszperziós reláció látható, a b) részén pedig az állapotsűrűség, amelyet az

$$\int \mathrm{d}\omega\, g(\omega) = \frac{1}{L}\sum_{\mathbf{k}} = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}$$

összefüggésből kapható, ahol L az egydimenziós rendszer hossza. Ebből tehát

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)^{-1} = \frac{1}{2\pi}\left(c\frac{ck}{\sqrt{(ck)^2+\omega_0^2}}\right)^{-1} = \frac{1}{2\pi c}\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2-\omega_0^2}}.$$



6.2. ábra. Az optikai fononok diszperziós relációja és állapotsűrűsége.

b.) Az impulzustérben izotróp csoportsebesség

$$\left|\frac{\partial\omega}{\partial\mathbf{k}}\right| = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = c\frac{ck}{\sqrt{(ck)^2+\omega_0^2}}.$$

$k \to 0$-ra $\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \to c^2\frac{k}{\omega_0}$, és a diszperzió közelítőleg $\omega(\mathbf{k}) \approx \omega_0 + \frac{\mathbf{k}^2}{2\omega_0/c^2}$. A fononok effektív tömege a sáv alján így $m_{\mathrm{eff}} = \omega_0/c^2$. Ezzel szemben a $k \to \infty$ határesetben $\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \to c$. Eszerint a c konstans a fononok csoportsebessége nagy hullámszámoknál.

Megjegyezzük, hogy az optikai fonon módusok a legtöbb kristály esetén csak az optikai gerjesztések leírásában játszanak fontos szerepet - nagy energiájuk miatt termodinamikai egyensúlyban nincsenek betöltve. Azonban egy a kristály torzulásával járó fázisátalakulás közelében az optikai fononok energiája csökken és így egyensúlyban is figyelembe kell venni ezeknek a rezgési módusoknak a jelenlétét.

6.4. Rács megolvadása

Egy kristályban a rácsrezgések amplitúdója függ a hőmérséklettől. Ha az atomok kitérése egyensúlyi helyzetükből a rácsállandó nagyságrendjébe esik, akkor a kristályos állapot instabillá válhat és megolvadhat. Ebben a fejezetben az olvadáshoz szükséges hőmérsékletet, azaz az olvadáspontot becsüljük meg.

Egy atom kitérésének szórása

$$\langle|u|^2\rangle = \langle|\mathbf{u}(\mathbf{R})|^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{R}}\langle|\mathbf{u}(\mathbf{R})|^2\rangle = \frac{1}{N^2}\sum_{\mathbf{R}}\sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{R}}\langle\mathbf{u}^*(\mathbf{q})\mathbf{u}(\mathbf{q}')\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\langle|\mathbf{u}(\mathbf{q})|^2\rangle$$

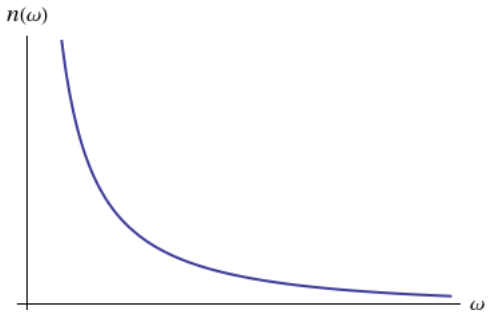
a transzláció invariancia miatt. Kvantummechanikai leírás alapján (melyet itt most nem részletezünk)

$$\langle|\mathbf{u}(\mathbf{q})|^2\rangle = \sum_s \frac{\hbar}{m\omega_s(\mathbf{q})}\left(n(\omega_s(\mathbf{q})) + \frac{1}{2}\right)$$

írható, ahol

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \qquad \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}$$

a Bose-Einstein eloszlás (6.3. ábra) és s a különböző diszperziós ágakat (polarizációkat) indexeli. A képletben $k_{\mathrm{B}} = 1,38 \cdot 10^{-23}\,\mathrm{J/K}$ a Boltzmann-állandó.



6.3. ábra. Bose-Einstein eloszlás

$$\langle |u|^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s\mathbf{q}} \frac{\hbar}{m\omega_s(\mathbf{q})} \left(n(\omega_s(\mathbf{q})) + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{N} \int \mathrm{d}\omega G(\omega) \frac{\hbar}{m\omega} \left(n(\omega) + \frac{1}{2} \right) =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{N} \int \mathrm{d}\omega G(\omega) \frac{\hbar}{m\omega} n(\omega)}_{\text{termikus járulék}} + \underbrace{\frac{1}{N} \int \mathrm{d}\omega G(\omega) \frac{\hbar}{m\omega} \frac{1}{2}}_{\text{zérusponti rezgések}}$$

A kifejezésben megjelenő zérusponti járulék nem függ a hőmérséklettől, vagyis abszolút zérus hőmérsékleten is jelen van.

Debye-modellben már korábban kiszámoltuk az állapotsűrűséget.

$$G(\omega) \propto \omega^{d-1}$$

egy d dimenziós rendszerben. A zérus ponti rezgések járuléka

$$\langle |u|^2 \rangle_{T=0} \propto \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} \mathrm{d}\omega\, \omega^{d-2},$$

mely egy dimenzióban

$$\langle |u|^2 \rangle_{T=0} \propto \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} \frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}$$

divergens az alsó határon, vagyis egy dimenzióban már a zérusponti rezgések „szétrázzák” a rácsot. Másképp fogalmazva, egy dimenzióban nem lehet hosszú távú rend az

atomok elhelyezkedésében zérus hőmérsékleten sem, azaz nem létezik egydimenziós kristály. Magasabb dimenziókban a zérusponti járulék véges, két dimenzióban $\langle|u|^2\rangle \propto \omega_\mathrm{D}$, három dimenzióban pedig $\langle|u|^2\rangle \propto \omega_\mathrm{D}^2$. A termikus járulékot egzaktul nem tudjuk meghatározni. Alacsony hőmérsékleten azonban elég csak a kis frekvenciájú tartományra koncentrálnunk, ahol $n(\omega) \approx (\beta\hbar\omega)^{-1}$ teljesül vezető rendben. Két dimenzióban

$$\langle|u|^2\rangle_T \propto \int_0^{\omega_\mathrm{D}} \frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}$$

divergál a termikus járulék. A véges hőmérsékleti rezgések szétrázzák a kétdimenziós rácsot. Három dimenzióban a termikus járulék

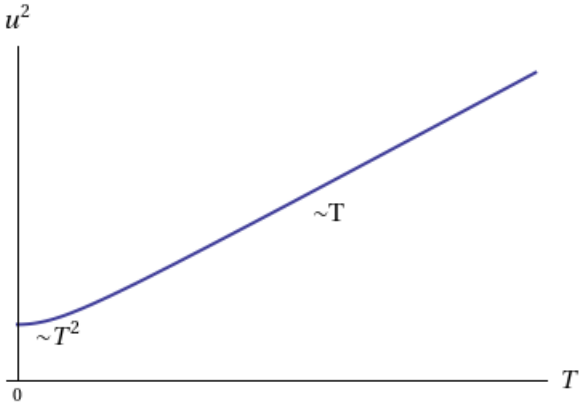
$$\langle|u|^2\rangle_T = \frac{V}{2\pi^2c^3N}\int_0^{\omega_\mathrm{D}} \mathrm{d}\omega\,\frac{\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{V_c}{2\pi^2c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2\int_0^{\Theta_\mathrm{D}/T}\mathrm{d}x\,\frac{x}{e^x-1}$$

szerint írható, ahol $\Theta_\mathrm{D} = \hbar\omega_\mathrm{D}/k$ a Debye-hőmérséklet és V_c az elemi cella térfogata. Magas hőmérsékleten $T \gg \Theta_\mathrm{D}$ az integrál kis x értékéken fut végig, ekkor az integrandus sorba fejthető és

$$\frac{x}{e^x-1} \approx \frac{x}{x} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \langle|u|^2\rangle_{T\gg\Theta_\mathrm{D}} \approx \frac{V_c}{2\pi^2c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^2\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T} \propto T \tag{6.1}$$

adódik. Alacsony hőmérsékleten $\Theta_\mathrm{D} \gg T$, vagyis $\Theta_\mathrm{D}/T \to \infty$ tekinthető. Ekkor a termikus járulékot megadó integrál már nem függ a hőmérséklettől, azaz

$$\langle|u|^2\rangle_{T\ll\Theta_\mathrm{D}} \propto T^2.$$



6.4. ábra.

A rács olvadásáról akkor beszélünk, ha $\sqrt{\langle|u|^2\rangle} = \alpha a$, ahol a a rácsállandó és $\alpha \lesssim 1$. Ekkor a rács olvadás pontja megbecsülhető.

$$T_\mathrm{m} = \frac{2\pi^2\hbar^2\alpha^2a^2c^3}{V_ck^2\Theta_\mathrm{D}}$$

(Irodalom: Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai I. 12.3.2. fejezet)

Ebben a fejezetben láttuk, hogy egy egydimenziós kristályt már a zérusponti, egy kétdimenziós kristályt pedig a termikus rezgések rázzák szét. Ennek látszólag ellentmond az a tény, hogy kísérletileg sikerült előállítani kétdimenziós anyagot (pl.: grafén). Az ellentmondást az oldhatja fel, hogy ezek az anyagok nem tökéletesen kétdimenziós objektumok, hanem hullámosak. Ezek a hullámok („ráncok") képesek stabilizálni a rácsot.

6.5. Házi feladatok

13. házi feladat

Mutasd meg, hogy egy 2-dimenziós izotróp rendszerben az alacsony hõmérsékletû fonon fajhõ T^2 szerint változik!

7. fejezet

Elektronok Dirac-delta potenciálsorban

7.1. Elektronok rácsperiodikus potenciálban

Egy rácsban, rögzített atomok esetén, az elektronok diszkrét transzlációs szimmetriával bíró potenciálban mozognak. A rácsvektorokat ebben a fejezetben $\mathbf{R}$-rel jelöljük. Az egyrészecske Hamilton-operátor

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) \qquad U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \quad \forall \mathbf{R}$$

sajátérték egyenletének

$$H\Psi_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\mathbf{k})\Psi_{n\mathbf{k}} \tag{7.1}$$

megoldásai a $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Bloch-függvények, melyekre teljesül $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ minden $\mathbf{R}$ esetén (Bloch-tétel).

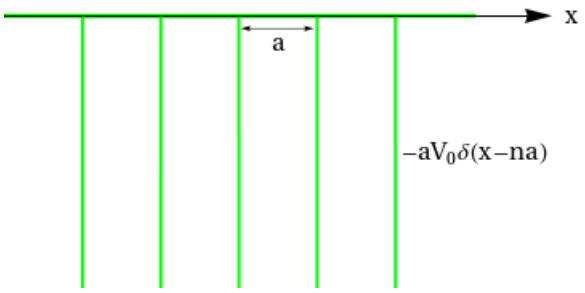
Ebben a jegyzetben csak nem kölcsönható elektronrendszereket vizsgálunk, vagyis elhanyagoljuk az elektronok közti Coulomb-kölcsönhatást.

Csoportelméleti megfogalmazásban $\Psi_{n\mathbf{k}}$ az eltolási csoport $\mathbf{k}$-val indexelt irreducibilis ábrázolásához tartozó hullámfüggvény és mivel a Hamilton-operátor felcserélhető az eltolásokkal, az egyrészecske-sajátállapotok is ilyenek lesznek. Az eltolási csoport irreducibilis ábrázolásait az első Brillouin-zóna $\mathbf{k}$ hullámszámai indexelik, a további hullámszámok nem adnak új ábrázolást. Egy irreducibilis ábrázoláshoz több invariáns sajátaltér is tartozhat, ezeket jelöli az n sávindex.

A Bloch-függvények mindig felírhatók $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ alakban, ahol $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ minden $\mathbf{R}$ eltolásra.

A (7.1) egyenlet sajátfüggvényeit és az $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ diszperziós relációt általános potenciál esetén nem lehet egzaktul meghatározni. Kivételt jelent például a Dirac-delta potenciálok alkotta rács.

7.2. Dirac-delta potenciálsor egy dimenzióban



7.1. ábra.

Az egyrészecske Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} - V_0 a \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

alakban írható, ahol a a rácsállandó és V_0 a Dirac-delta potenciálok erőssége. A potenciál rendelkezik diszkrét eltolási szimmetriával, ezért a Schrödinger-egyenlet megoldásai Bloch-függvények a Bloch-tétel értelmében. Ezt később még ki fogjuk használni.

A Schrödinger-egyenletet a következő stratégia szerint oldjuk meg. A teljes teret felbontjuk a hosszúságú szakaszokra (az n-edik szakasz: $(n-1)a < x < na$). Egy L hosszúságú minta esetén $N = L/A$ a szakaszok (cellák) száma. A Dirac-delta csúcsok között a potenciál zérus, ezért a szakaszok belsejében a Schrödinger-egyenlet könnyen meg lehet oldani. Ezek a $\Psi^{(n)}(x)$ megoldások tartalmaznak szabad paramétereket, melyeket a szakaszhatárokon történő illesztéssel lehet meghatározni. Fontos szem előtt tartani a számolás során, hogy a cél a lehetséges egyrészecske-energiák meghatározása. Az n-edik szakaszon tehát a Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi^{(n)}}{\mathrm{d}x^2} = E\Psi^{(n)}(x)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi^{(n)}}{\mathrm{d}x^2} + K^2\Psi^{(n)}(x) = 0 \qquad\qquad K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

általános megoldása

$$\Psi^{(n)}(x) = A^{(n)}e^{iKx} + B^{(n)}e^{-iKx}$$

valamilyen $A^{(n)}$ és $B^{(n)}$ együtthatókkal. Az együtthatók különböző szakaszokon más és más értéket vehetnek fel. Ezt a $2N$ db együtthatót az N db rácspontban történő illesztéssel határozhatjuk meg. A teljes megoldásra a rácsperiodikus potenciál miatt

$\Psi(x) = e^{ikx}u_k(x)$ is kell, hogy teljesüljön, melyre $u_k(x + na) = u_k(x)$ minden $n \in \mathbb{Z}$ esetén. A továbbiakban Ψ-t is indexeljük k-val. Az egyes szakaszokon

$$u_k^{(n)}(x) = A_k^{(n)}e^{i(K-k)x} + B_k^{(n)}e^{-i(K+k)x} \qquad (n-1)a < x < na$$

írható. A rácsperiodicitás miatt

$$u_k^{(n)}(x) = u_k^{(n-1)}(x-a)$$

$$e^{i(K-k)x}\left[A_k^{(n)} - A_k^{(n-1)}e^{-i(K-k)a}\right] + e^{-i(K+k)x}\left[B_k^{(n)} - B_k^{(n-1)}e^{i(K+k)a}\right] = 0.$$

Az $e^{i(K-k)x}$ és $e^{-i(K+k)x}$ függvények függetlenek, ezért

$$A_k^{(n)} = A_k^{(n-1)}e^{-i(K-k)a} = A_k^{(0)}e^{-i(K-k)na}$$

$$B_k^{(n)} = B_k^{(n-1)}e^{i(K+k)a} = B_k^{(0)}e^{i(K+k)na}$$

összefüggést kapjuk az együtthatókra. Így már csak két független együttható van a $2N$ helyett; $A_k^{(0)}$ és $B_k^{(0)}$. Valamely rácspontban történő illesztésnél két összefüggést írhatunk fel erre a két együtthatóra. Látni fogjuk azonban, hogy mindkét egyenlet csak a két együttható hányadosára ad megszorítást. A két egyenlet tehát túlhatározott, csak a bennük lévő paraméterek (energia, hullámszám) bizonyos értékei mellett oldhatóak meg. Ezt figyelembe véve fogjuk tudni kiszámolni a lehetséges egyrészecske-energiákat. Az $A_k^{(0)}$ és $B_k^{(0)}$ együtthatók pontos értékét a hullámfüggvény normáltságát kihasználva tudnánk meghatározni, de ezt itt már nem vezetjük le.

Valamely rácspontban tehát fel kell írni az illesztésből adódó összefüggéseket. Az $n = 0$ helyen levő rácspontban a két oldalon a hullámfüggvénynek meg kell egyeznie.

$$\lim_{\delta\to 0^+} \Psi_k(0+\delta) = \lim_{\delta\to 0^+} \Psi_k(0-\delta)$$

$$\lim_{\delta\to 0^+} \Psi_k^{(1)}(\delta) = \lim_{\delta\to 0^+} \Psi_k^{(0)}(-\delta)$$

$$A_k^{(0)}e^{-i(K-k)a} + B_k^{(0)}e^{i(K+k)a} = A_k^{(0)} + B_k^{(0)} \tag{7.2}$$

A Dirac-delta potenciál miatt a hullámfüggvény deriváltja ugrik a határon.

$$\lim_{\delta\to 0^+} [\Psi_k'(0+\delta) - \Psi_k'(0-\delta)] = -\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\Psi_k(0)$$

$$A_k^{(0)}e^{-i(K-k)a} - B_k^{(0)}e^{i(K+k)a} - A_k^{(0)} + B_k^{(0)} = i\frac{2mV_0a}{\hbar^2K}\left[A_k^{(0)} + B_k^{(0)}\right] \tag{7.3}$$

A (7.2) és (7.3) egyenletek akkor teljesülnek, ha

$$\cos ka = \cos Ka - \frac{mV_0a^2}{\hbar^2}\frac{\sin Ka}{Ka}. \tag{7.4}$$

Ekkor

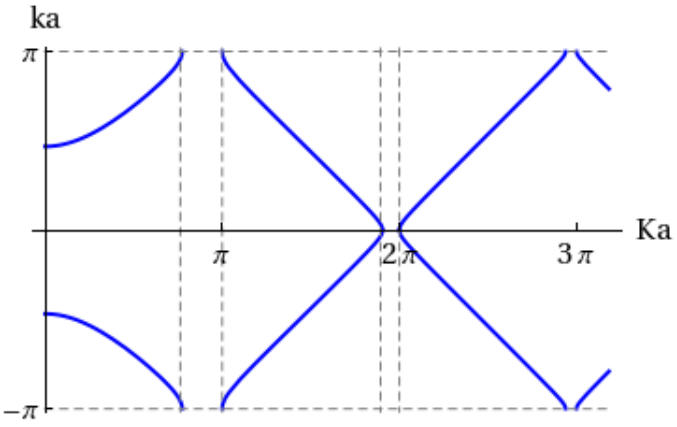
$$\frac{A_k^{(0)}}{B_k^{(0)}} = \frac{\sin\left(\frac{K+k}{2}a\right)}{\sin\left(\frac{K-k}{2}a\right)} e^{iKa}$$

a keresett együtthatókra. A pontos értéküket a hullámfüggvény normáltságát kihasználva határozhatjuk meg ($\int |\Psi(\mathbf{r})|^2 \mathrm{d}V = 1$ Bloch-függvényekre is teljesül).

A (7.4) egyenlet nagyon fontos eredményünk, mert ez adja meg az elektron energiája ($E = \hbar^2 K^2/(2m)$) és a hullámszáma (k) közti összefüggést, vagyis a diszperziós relációt. Kötött állapotok esetén ($E < 0$) K tisztán képzetes, vagyis $K = i\Gamma$ alakban írható. Ez a haladó síkhullám megoldás helyett egy exponenciálisan lecsengő, lokalizált megoldást jelent. Ekkor a (7.4) egyenlet

$$\cos ka = \mathrm{ch}\Gamma a - \frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \frac{\mathrm{sh}\Gamma a}{\Gamma a}$$

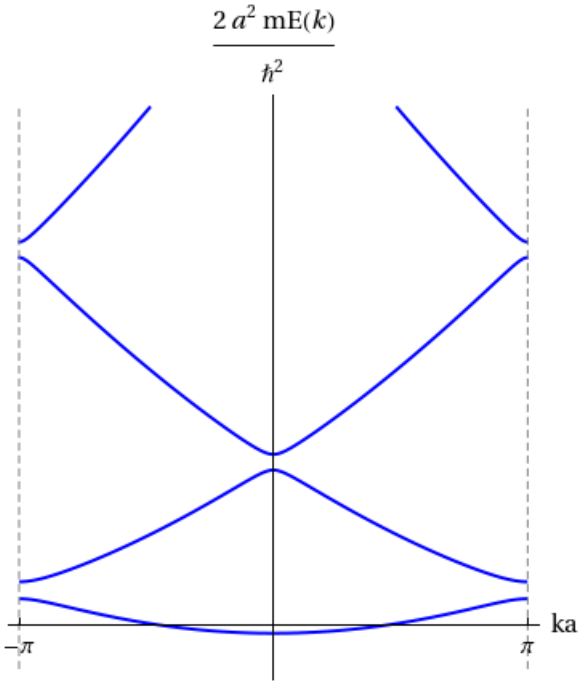
szerint módosul. Látható, hogy ennek csak akkor van megoldása, ha $V_0 > 0$, vagyis vonzó Dirac-delta potenciálokból áll a rács.



7.2. ábra. A (7.4) egyenlet megoldásának grafikus szemléltetése. Az ábrázolásnál $mV_0a^2/\hbar^2 = 0,9$ volt.

7.2.1. Tiltott sáv nagyságának kiszámítása gyenge potenciál esetén

Ha $mV_0a^2/\hbar^2 \ll 1$, akkor feltesszük, hogy az első tiltott sáv (ld. 7.2-7.3. ábra) nagysága is kicsi. A tiltott sáv a Brillouin-zóna szélénél van, ahol $k = \pi/a$ miatt $\cos ka = -1$. A tiltott sáv nagysága $\Delta = E_0 - E_1$, ahol E_0 és E_1 a tiltott sáv felső és alsó élének energiaszintje, valamint teljesül, hogy $E_0 = \hbar^2 K_0^2/(2m)$, ahol $K_0 = \pi/a$. Ha a gap kicsi,



7.3. ábra. Sávszerkezet Dirac-delta potenciál esetén. Az ábrán jól látható, hogy tiltott sávok alakulnak ki. Feltüntettük a negatív energiájú állapotokat is. Az ábrázolásnál $mV_0a^2/\hbar^2 = 0,9$ volt.

akkor feltesszük, hogy a (7.4) jobb oldala K-ban K_0 körül másodrendig sorfejthető. Azt, hogy ezt tényleg megtehetjük-e, később igazolnunk kell.
A sorfejtés:

$$K = K_0 + \delta K \qquad \delta K a \ll K_0 a = \pi \qquad\qquad A = \frac{mV_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

$$\cos Ka - A\frac{\sin Ka}{Ka} \approx -1 + \frac{A}{\pi}a\delta K + \left(\frac{1}{2} - \frac{A}{\pi^2}\right)(a\delta K)^2$$

A tiltott sáv széleit a $k = \pi/a$, vagyis a $\cos ka = -1$ feltétel határozza meg.

$$-1 = -1 + \frac{A}{\pi}a\delta K + \left(\frac{1}{2} - \frac{A}{\pi^2}\right)(a\delta K)^2$$

$$a\delta K = 0 \quad \text{triviális megoldás}$$

$$a\delta K = -\frac{A}{\pi\left(\frac{1}{2} - \frac{A}{\pi^2}\right)} \approx -\frac{2A}{\pi}$$

A nem triviális megoldásra teljesül, hogy $|a\delta K| = 2A/\pi \ll 1$, vagyis jogos volt a feltevésünk, amely alapján a sorfejtést elvégeztük.

$$K_1 = K_0 + \delta K = \frac{\pi}{a}\left(1 - \frac{2A}{\pi^2}\right)$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2A}{\pi^2}\right)^2 \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{4A}{\pi^2}\right)$$

$$\Delta = E_0 - E_1 = \frac{2\hbar^2 A}{ma^2} = 2V_0$$

Tehát gyenge potenciál esetén a tiltott sáv nagysága $2V_0$.

7.2.2. Legalacsonyabb energiájú állapot gyenge potenciál esetén

Ha $V_0 > 0$, akkor a legalsó sáv alja negatív energiájú (kötött) állapot. Gyenge potenciál esetén a sáv alsó szélénél ($k = 0$)

$$1 = 1 + \frac{(\Gamma_0 a)^2}{2} - \frac{A}{\Gamma_0 a}\left[\Gamma_0 a + \frac{(\Gamma_0 a)^3}{3!}\right],$$

melynek megoldása

$$\Gamma_0 a = \sqrt{3A}$$

és a legalacsonyabb energia értéke

$$E_{min} = -\frac{3}{2}V_0.$$

7.2.3. Sávszélesség erős rácspotenciál esetén

Azt szeretnénk meghatározni, hogy mekkora a kialakult sávszerkezet legalsó sávjának sávszélessége. Azt várjuk, hogy nagyon erős potenciál esetén a sávszélesség kicsi lesz a tiltott sávok nagyságához képest. Feltesszük, hogy ha elég erős a rácspotenciál, akkor a teljes sáv a negatív energiájú tartományba esik ($E < 0$). Kötött állapotokra a diszperziós reláció

$$\cos ka = \mathrm{ch}\Gamma a - A\frac{\mathrm{sh}\Gamma a}{\Gamma a} \qquad A = \frac{mV_0a^2}{\hbar^2} \qquad E = -\frac{\hbar^2\Gamma^2}{2m}$$

alakban írható. A sáv alja $k = 0$-nál van (Γ_1), míg a sáv teteje $k = \pi/a$-nál (Γ_2). A sávszélesség $W = E_2 - E_1$ lesz.

$$k = 0 \quad \Rightarrow \quad 1 = \mathrm{ch}\Gamma_1 a - A\frac{\mathrm{sh}\Gamma_1 a}{\Gamma_1 a}$$

$$k = \frac{\pi}{a} \quad \Rightarrow \quad -1 = \mathrm{ch}\Gamma_2 a - A\frac{\mathrm{sh}\Gamma_2 a}{\Gamma_2 a}$$

Ha A nagy, akkor feltesszük, hogy $\Gamma_1 a$ is és $\Gamma_2 a$ is nagy. Ezt később ellenőrizni kell, hogy valóban teljesül-e. Ekkor $\mathrm{ch}\Gamma_1 a \approx e^{\Gamma_1 a}/2$ és $\mathrm{sh}\Gamma_1 a \approx e^{\Gamma_1 a}/2$ miatt

$$1 \approx \frac{e^{\Gamma_1 a}}{2}\left(1 - \frac{A}{\Gamma_1 a}\right) \quad \Rightarrow \quad \Gamma_1 a = A + 2\Gamma_1 a e^{-\Gamma_1 a} \approx A + 2Ae^{-A}$$

$$-1 \approx \frac{e^{\Gamma_2 a}}{2}\left(1 - \frac{A}{\Gamma_2 a}\right) \quad \Rightarrow \quad \Gamma_2 a = A - 2\Gamma_2 a e^{-\Gamma_2 a} \approx A - 2Ae^{-A}$$

írható. Ezzel láthatjuk, hogy nagy A esetén $\Gamma_1 a$ és $\Gamma_2 a$ is nagy, vagyis jogos volt a feltevésünk, amely alapján a sorfejtést elvégeztük. A sávszélesség

$$W = E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\Gamma_1^2 - \Gamma_2^2\right) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} 8A^2 e^{-A} = \frac{4ma^2 V_0^2}{\hbar^2} e^{-\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2}}.$$

Megjegyezzük, hogy $A \to \infty$ esetben a sávszélesség zérushoz tart, vagyis diszperzió nélküli sávot, diszkrét energia szintet kapunk. Az $A \to \infty$ limesz fizikailag interpretálható úgy is, hogy az atomokat végtelen távol visszük egymástól (A tartalmazza a-t). Vagyis az imént független atomok diszkrét nívóját kaptuk meg. Megjegyezzük, hogy a vonzó Dirac-delta potenciállal jellemzett atomnak csak egyetlen kötött (negatív energiájú) állapota van, így az ilyen atomokból álló rács spektrumában csak egyetlen (a legalsó) sávban lesznek kötött állapotok. (Irodalom: Kronig, R. de L.; Penney, W. G. Proc. Roy. Soc. London, **A130**, 499, 1931)

8. fejezet

Közel szabad elektronok diszperziós relációja (egy dimenzió)

Ebben a fejezetben a szilárdtestbeli elektronok energiaspektrumát közel szabad elektron közelítésben számítjuk ki. Ez a módszer jó fémek sávszerkezetének leírására alkalmas. Közel szabad elektron közelítésben a rácsatomok elektronokra gyakorolt hatását perturbációként vesszük figyelembe. A perturbálatlan rendszer tehát a szabad elektron gáz, melynek diszperziós relációja $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/(2m)$ a sajátfüggvények pedig $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}}/\sqrt{V}$. A gyenge perturbáció a redukált zónaképben megjelenő degenerációk felhasadásához vezet, ezért ezen pontok környékén fog lényeges változást okozni az elektron diszperziós relációjában.

Először átismételjük a rácsperiodikus potenciálok esetén felírható, Bloch-állapotokra vonatkozó Schrödinger-egyenlettel kapcsolatos levezetést, majd áttérünk a közel szabad elektronok perturbatív kezelésére. Rácsperiodikus potenciál esetén a Schrödinger-egyenlet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right]\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \qquad\qquad V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$$

megoldásai a Bloch-tétel alapján a

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \qquad\qquad u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

alakban felírható Bloch-függvények (itt $\mathbf{k}$ az első Brillouin-zóna hullámszám vektora). Ezzel behelyettesítve

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-i\nabla + \mathbf{k}\right)^2 + V(\mathbf{r})\right]u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

adódik. A rácsperiodikus függvények Fourier-sorában csak a reciprokrács-vektoroknak megfelelő komponensek szerepelnek.

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{Gr}}\tilde{V}(\mathbf{G}) \qquad\qquad u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{Gr}}c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G})$$

Ezzel a Schrödinger-egyenletbe behelyettesítve és kihasználva az $e^{i\mathbf{Gr}}$ függvények függetlenségét kapjuk a

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{G}+\mathbf{k})^2 c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) + \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}') = \varepsilon_n(\mathbf{k})c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \qquad \forall \mathbf{G} \qquad (8.1)$$

egyenletet. Általánosan ez az egyenlet sem megoldható, valamilyen közelítést kell alkalmazni.

8.1. Közel szabad elektron közelítés

Ebben a fejezetben feltesszük, hogy a rácsperiodikus potenciál annyira gyenge, hogy hatását perturbáció számítással figyelembe lehet venni. Ehhez először vizsgáljuk meg a perturbálatlan rendszert, vagyis a szabad elektrongázt, redukált zónaképben.

Teljesen szabad elektronrendszer esetén minden $\mathbf{G}$ reciprokrács-vektorra $V(\mathbf{G}) = 0$. A Schrödinger-egyenlet egzaktul megoldható, a sajátértékek $\varepsilon^0(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/(2m)$ és a sajátfüggvények a $\Psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}}/\sqrt{V}$ síkhullámok, ahol V a szilárdtest térfogata. Konvenciónk szerint a Bloch-tételben szereplő $\mathbf{k}$ vektort úgy választjuk, hogy az a Brillouin-zóna eleme legyen. Tegyük fel, hogy a szabadelektron-állapot hullámszámvektora olyan $\mathbf{K}$, amely nem tartozik a Brillouin-zónához. Ekkor $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$, ahol $\mathbf{G}$ egy reciprokrács vektor. Az $1/\sqrt{V}e^{ikr}e^{iGr}$ hullámfüggvény Bloch-függvény, hiszen a második tényező definíció szerint rácsperiodikus. A Brillouin-zóna minden $\mathbf{k}$ vektorához megszámlálható sok $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ hullámszámvektorú szabadelektron-állapot tartozik. Ezeket az állapotokat $\mathbf{k}$-val és $\mathbf{G}$-vel indexeljük. Így a perturbálatlan energiák és hullámfüggvények:

$$\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2(\mathbf{k}+\mathbf{G})^2}{2m} \qquad \Psi^0_{\mathbf{Gk}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}}$$

A perturbálatlan rendszer diszperziós relációját az 8.1. ábrán ábrázoltuk. A további számolásokban a sajátállapotot $|\mathbf{kG}\rangle$-vel is jelöljük.

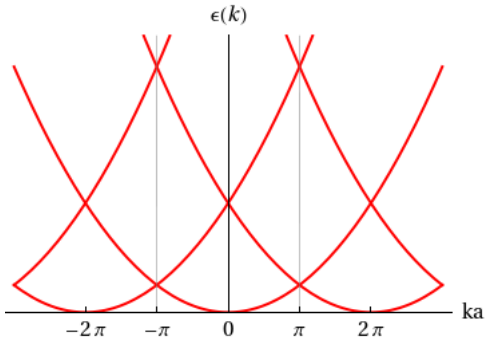
A perturbáció hatására első rendben a sajátenergiákhoz hozzáadódik a perturbáló potenciál várható értéke.

$$\varepsilon_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) = \varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) + \langle \mathbf{kG}|\hat{V}|\mathbf{kG}\rangle$$

$$\langle \mathbf{kG}|\hat{V}|\mathbf{kG}\rangle = \int \mathrm{d}^d r\, \Psi^{0*}_{\mathbf{Gk}}(\mathbf{r})\, V(\mathbf{r})\, \Psi^0_{\mathbf{Gk}}(\mathbf{r}) =$$

$$= \int \mathrm{d}^d r\, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}}\, V(\mathbf{r})\, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}} = \frac{1}{V}\int \mathrm{d}^d r\, V(\mathbf{r}) = \tilde{V}(\mathbf{G}=0)$$

A perturbáló potenciál várható értéke a potenciál függvény $\mathbf{G} = 0$-hoz tartozó Fourier-komponense, amely független $\mathbf{k}$-tól és $\mathbf{G}$-től, ezért a diszperziós reláció struktúráját nem változtatja meg, csak egy konstanssal tolja el az egyrészecske-energiákat.



8.1. ábra. Szabad elektron gáz diszperziós relációja redukált zónaképben

A perturbáció számítás második rendjében az sajátenergiák

$$\varepsilon_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) = \varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) + \tilde{V}(\mathbf{G}=0) + \sum_{\mathbf{G}'\neq\mathbf{G}} \frac{|\langle \mathbf{kG}|\hat{V}|\mathbf{kG}'\rangle|^2}{\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) - \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})}$$

szerint módosulnak. A képletben az összegzés az összes $\mathbf{G}'$ reciprokrács-vektoron végigfut $\mathbf{G}$-t kivéve. A diszperziós relációban megjelenő mátrixelemek éppen a perturbáló potenciál Fourier komponenseivel egyeznek meg.

$$\langle \mathbf{kG}|\hat{V}|\mathbf{kG}'\rangle = \int \mathrm{d}^d r\, \Psi^{0*}_{\mathbf{Gk}}(\mathbf{r})\, V(\mathbf{r})\, \Psi^0_{\mathbf{G}'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) =$$

$$= \int \mathrm{d}^d r\, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}}\, V(\mathbf{r})\, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}')\mathbf{r}} = \frac{1}{V}\int \mathrm{d}^d r\, e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')} V(\mathbf{r}) = \tilde{V}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$$

Így kapjuk a diszperziós reláció

$$\varepsilon_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) = \varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) + \tilde{V}(\mathbf{G}=0) + \sum_{\mathbf{G}'\neq\mathbf{G}} \frac{|\tilde{V}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')|^2}{\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) - \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})} \tag{8.2}$$

kifejezését. A másodrendű korrekción jól látható, hogy a számolásunk nem érvényes abban az esetben, ha a nevezőben szereplő $\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) - \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})$ túl kicsi lenne, vagyis a degenerációs pontok környékén. Ekkor ugyanis a másodrendű korrekció nagyon nagy lenne az első- és nulladrendűhöz képest. Ha éppen a degenerációs pontban vizsgálódunk, akkor a helyzet még rosszabb, hiszen a másodrendű korrekció divergálna. A (8.2) eredmény tehát csak a degenerációs pontoktól távoli tartományokban érvényesek.

Érdemes még megemlíteni, hogy amennyiben $\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) > \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})$, akkor a perturbáció hatására a $\mathbf{G}'$ állapotok járuléka növeli a $\mathbf{G}$ állapot egyrészecske-energiáját. Ha viszont $\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) < \varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k})$, akkor a $\mathbf{G}'$ állapotok járuléka csökkenti az egyrészecske-energiát. Ezt szemléletesen úgy is lehet interpretálni, hogy a diszperziós ágak a perturbáció bekapcsolásával taszítják egymást.

8.2. Közel szabad elektron közelítés - degenerációs pontok egy dimenzióban

Az előző fejezetben láttuk, hogy a degenerációs pontoktól távol hogyan módosul a diszperziós reláció gyenge rácsperiodikus potenciál hatására. A kapott eredmény nem érvényes a degenerációs pontok közelében, ahol degenerált perturbációszámítást kell alkalmazni. Látni fogjuk, hogy ezt a számolást elég első rendig elvégezni ahhoz, hogy nem triviális korrekciót találjunk a diszperziós relációban.

Egy egydimenziós rendszerben a Brillouin-zóna szélénél és a közepénél találhatunk kétszeresen degenerált pontokat, melyben valamilyen $\mathbf{G}$ és $\mathbf{G}'$ reciprokrács-vektorokkal $\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_0) = \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k}_0)$, ahol $\mathbf{k}_0 = 0$ vagy $\mathbf{k}_0 = \pi/a$ attól függően, hogy a Brillouin-zóna közepénél vagy szélénél lévő degenerációs pontot vizsgálunk. A degenerációs pont közelében található állapotokra degenerált perturbációszámítást kell alkalmazni. Eszerint meg kell határozni a Hamilton-operátor mátrixát a degenerált altéren, melynek sajátértékei lesznek az új sajátenergiák.

A Hamilton-operátor mátrixa a $|\mathbf{k}\mathbf{G}\rangle$ és $|\mathbf{k}\mathbf{G}'\rangle$ állapotok által kifeszített altérben

$$\begin{pmatrix} \varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) + \tilde{V}(0) & \tilde{V}(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \\ \tilde{V}(\mathbf{G}'-\mathbf{G}) & \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k}) + \tilde{V}(0) \end{pmatrix}$$

alakú, amelynek sajátértékei

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \tilde{V}(0) + \frac{\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) + \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) - \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})}{2}\right)^2 + |\tilde{V}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')|^2}$$

adják a diszperziós reláció perturbált alakját. A $\mathbf{k}_0$-ban lévő degeneráció felhasad és a kialakuló gap (tiltott sáv) nagysága

$$\Delta = 2|\tilde{V}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')|.$$

Magasabb dimenziójú rendszerben a kétszeresen degenerált pontok ugyanilyen módon hasadnak fel.

8.3. Példa feladatok közel szabad elektron közelítésre egy dimenzióban

8.3.1. Tiltott sáv számolása

Kapcsoljunk be egydimenziós szabad elektronrendszerben egy gyenge

$$V(x) = 8V_0 \sin^4\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

potenciált. Kérdés, hogy mekkora a rácsállandó és hogy mekkora tiltott sávok alakulnak ki a sávszerkezetben. Ehhez meg kell határozni a potenciál Fourier-komponenseit. Tudjuk, hogy

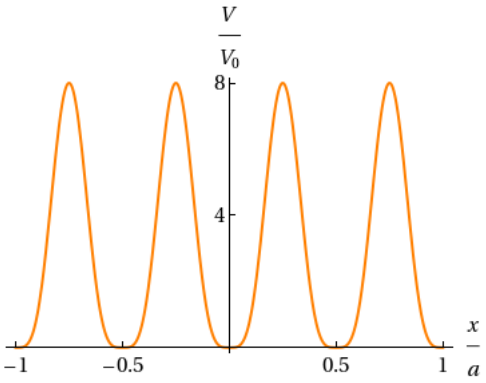
$$\sin^4\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = \frac{1}{8}\left(3 - 4\cos\left(2\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(4\frac{2\pi}{a}x\right)\right).$$

Így a potenciál

$$V(x) = V_0\left(3 - 4\cos\left(2\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(4\frac{2\pi}{a}x\right)\right),$$

melyet ábrázolva kapjuk az 8.2. ábrát, melyről leolvashatjuk, hogy a rácsállandó

$$a_0 = \frac{a}{2}.$$



8.2. ábra.

Ezek szerint a reciprokrács-vektorok a

$$G = h\frac{2\pi}{a_0} \qquad\qquad h \in \mathbb{Z}$$

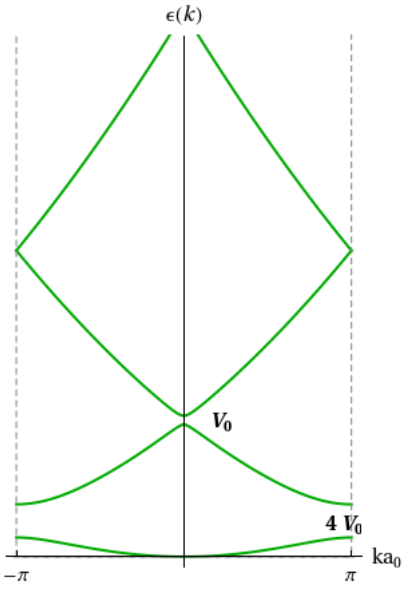
vektorok lesznek. Tovább alakítva a potenciál kifejezését

$$V(x) = 3V_0 - 2V_0\left(e^{i\frac{2\pi}{a_0}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a_0}x}\right) + \frac{V_0}{2}\left(e^{i2\frac{2\pi}{a_0}x} + e^{-i2\frac{2\pi}{a_0}x}\right)$$

adódik, vagyis a Fourier-komponensek

$$\tilde{V}(G) = \begin{cases} \frac{V_0}{2} & \text{ha} \quad G = -2\frac{2\pi}{a_0} \\ -2V_0 & \text{ha} \quad G = -\frac{2\pi}{a_0} \\ 3V_0 & \text{ha} \quad G = 0 \\ -2V_0 & \text{ha} \quad G = \frac{2\pi}{a_0} \\ \frac{V_0}{2} & \text{ha} \quad G = 2\frac{2\pi}{a_0} \end{cases}.$$

Ez alapján meghatározható a egyrészecske-spektrumban nyíló gapek nagysága (8.3. ábra). Megjegyezzük, hogy a $G = 0$-hoz tartozó Fourier-komponens nem egy tiltott sáv kialakulását fogja okozni, hanem a teljes spektrum konstanssal történő eltolódását.



8.3. ábra. Az elektron spektrumban nyíló gap-ek.

8.3.2. Tiltott sávok

Egy egydimenziós láncon az elektronok diszperziós relációját kváziszabad közelítésben számoljuk ki. Az atomi potenciál $V_a(x) = \frac{V_0 a}{N\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ (Gauss-görbe) alakú, ahol $V_0 < 0$, $\sigma \lesssim \frac{a}{2}$, a a rácsállandó és N az elemi cellák száma. Határozd meg, hogy mekkora lesz a felhasadás a degenerációs pontokban.
Segítség:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx} = e^{-\frac{k^2\sigma^2}{2}}$$

Megoldás:
Az egydimenziós rács reciprokrács-vektorai

$$G_h = h\frac{2\pi}{a}.$$

A rácsperiodikus potenciál

$$V(x) = \sum_R V_a(x - R),$$

ahol az összegzés végigfut az összes rácsvektoron. A felhasadások nagysága egy adott degenerációs pontban

$$\Delta = 2|\tilde{V}(G_h)| \qquad \tilde{V}(G_h) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-iG_h x} V(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-iG_h x} \sum_R V_a(x - R) =$$

$$= \sum_R \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-iG_h x} V_a(x) = N \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, e^{-iG_h x} V_a(x) = V_0 a e^{-\frac{G_h^2 \sigma^2}{2}},$$

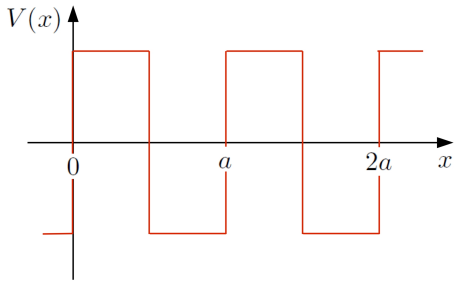
ahol G_h azon parabolák távolságát adja meg a hullámszám térben, melyek metszéspontját épp vizsgáljuk. Érdemes megjegyezni, hogy minél magasabb energiájú degenerációs pontot vizsgálunk, annál kisebb a felhasadás.

8.3.3. Négyszög potenciál

Az a rácsállandójú $V(x)$ egydimenziós, periodikus potenciálban elektronok mozognak. A potenciál egy perióduson belül

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{ha } x \in \left[0, \frac{a}{2}\right), \\ -V_0, & \text{ha } x \in \left[\frac{a}{2}, a\right). \end{cases}$$

Ábrázold vázlatosan a sávszerkezetet az első Brillouin-zónában, és határozd meg a szomszédos sávok között kialakuló tiltott sáv szélességét kváziszabad elektron közelítésben. Mi a közelítés alkalmazhatóságának feltétele?



8.4. ábra. Rácspotenciál.

Megoldás:
Fejtsük Fourier-sorba V-t:

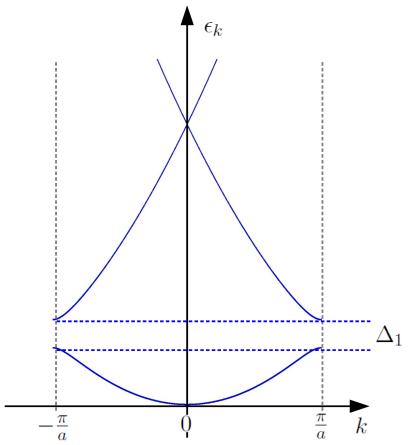
$$V(x) = \sum_G e^{iGx}\,\tilde{V}(G),\ \text{ahol } G = \frac{2\pi}{a}n,\ n \in \mathbb{Z}.$$

$$\tilde{V}(G) = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x\, V(x) e^{-iGx} = \begin{cases} 0, & \text{ha } n \text{ páros,} \\ \frac{2V_0}{i\pi n}, & \text{ha } n \text{ páratlan,} \end{cases}$$

A sávszerkezet a nem kölcsönható esetben, $\epsilon_G^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(G+k)^2$, amely a gyenge $V(x)$ potenciál hatására felhasad a degenerációs pontokban (lásd 8.5. ábra). A felhasadás mértéke

$$\Delta_n = 2\left|\tilde{V}\left(n\frac{2\pi}{a}\right)\right| = \begin{cases} 0, & \text{ha } n \text{ páros,} \\ \frac{4V_0}{\pi n}, & \text{ha } n \text{ páratlan.} \end{cases}$$

A kváziszabad elektron közelítés alkalmazhatóságának feltétele, hogy a kölcsönhatás



8.5. ábra. A degeneráció felhasadása a rácspotenciál hatására.

elég kicsi legyen ahhoz, hogy a másodrendű perturbációszámítás alkalmazható legyen ($V(G) \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$).

8.4. Házi feladatok

14. házi feladat

Tekintsünk egy L hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. Az atomi potenciált közelítsük egy négyszögjel alakú potenciállal. Határozzuk meg a sávok között kialakuló tiltott sávok szélességét!

15. házi feladat

Tekintsünk egy L hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. A rácsatomok hatását közelítsük a következõ periodikus potenciállal.

$$V(x) = V_0 \cdot \cos^3\left(4\pi \frac{x}{a}\right)$$

a) Mekkora a rácsállandó?
b) Határozzuk meg a sávok között kialakuló tilos sávok szélességét!
c) Mennyivel változik meg az alapállapot energiája ezen potenciál hatására?

9. fejezet

Közel szabad elektronok diszperziós relációja (két dimenzió)

Láthattuk, hogy egy egydimenziós rendszerben a kétszeresen degenerált degenerációs pontok kis környezetében a spektrum

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) + \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) - \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})}{2}\right)^2 + |V(\mathbf{G}-\mathbf{G}')|^2}$$

szerint írható.

9.1. Degenerációs pontok helye a hullámszámtérben

Több dimenziós rendszerekben a szabad elektronok kvázirészecske spektrumában többszörösen degenerált pontokat is találhatunk. Ezeknek a pontoknak a helyzetét az

$$\varepsilon^0_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) = \varepsilon^0_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k})$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{G})^2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{G}')^2$$

egyenlet határozza meg, vagyis $|\mathbf{k}+\mathbf{G}| = |\mathbf{k}+\mathbf{G}'|$ kell. Az ezeknek megfelelő első Brillouin-zónabeli $\mathbf{k}$ hullámszámoknál lesznek a degenerációs pontok.

A degenerációs pontok ott alakulnak ki, ahol az egyes reciprok rácspontokba helyezett forgási paraboloidok metszik egymást az első Brillouin-zónában.

(Irodalom: Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai II. 18.1. fejezet)

9.2. Közel szabad elektron közelítés kétdimenziós négyzetrácson

9.2.1. Szimmetria megfontolások

A négyzetrács elemi rácsvektorai $\mathbf{a}_1 = a(1;0)$ és $\mathbf{a}_2 = a(0;1)$. A rácsperiodikus potenciálra teljesül, hogy

$$V(x,y) = V(x+na, y+ma) \qquad \forall n,m \in \mathbb{Z}$$

A Fourier-komponensek

$$\tilde{V}(\mathbf{G}) = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \,\mathrm{d}A$$

között szimmetria megfontolások alapján különböző összefüggéseket találhatunk. Általában ha egy kristálynak szimmetriacsoportja $\mathcal{G}$, akkor bármely $P \in \mathcal{G}$ esetén $V(P\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$ és így

$$\tilde{V}(P\mathbf{G}) = \int V(\mathbf{r}) e^{i(P\mathbf{G})\mathbf{r}} \,\mathrm{d}A = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}(P^{-1}\mathbf{r})} \,\mathrm{d}A = \int V(P\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \,\mathrm{d}A = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \,\mathrm{d}A = \tilde{V}(\mathbf{G})$$

adódik (a számolás során kihasználtuk, hogy P ortogonális transzformáció), vagyis a Fourier-komponensek is ugyanazokkal a szimmetriákkal bírnak, mint a rács.

A négyzetrács reciprok rácsa is négyzetrács. A Fourier-komponenseket a továbbiakban $\tilde{V}(\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2) = \tilde{V}(h,k)$ szerint jelöljük. Feltesszük, hogy a kristály bír a négyzetrács összes szimmetriájával, így a potenciál Fourier-komponensei között az alábbi összefüggések írhatók fel.

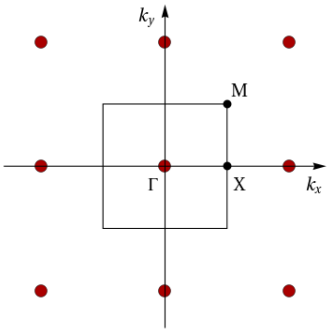
$$\tilde{V}(0,0) \qquad \text{független a többitől}$$

$$\tilde{V}(0,1) = \tilde{V}(1,0) = \tilde{V}(0,-1) = \tilde{V}(-1,0)$$
$$\tilde{V}(1,1) = \tilde{V}(1,-1) = \tilde{V}(-1,1) = \tilde{V}(-1,-1)$$
$$\vdots$$

9.2.2. Szabad elektronok diszperziós relációja

Legyen $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$! Vizsgáljuk meg, hogy a Brillouin-zóna nevezetes pontjaiban kialakuló degenerációs pontokban mennyi a perturbálatlan spektrum értéke! Emlékeztetünk, hogy a degenerációs pontok úgy alakulnak ki, hogy a különböző reciprok rácspontokba helyezett forgási paraboloidok metszik egymást.

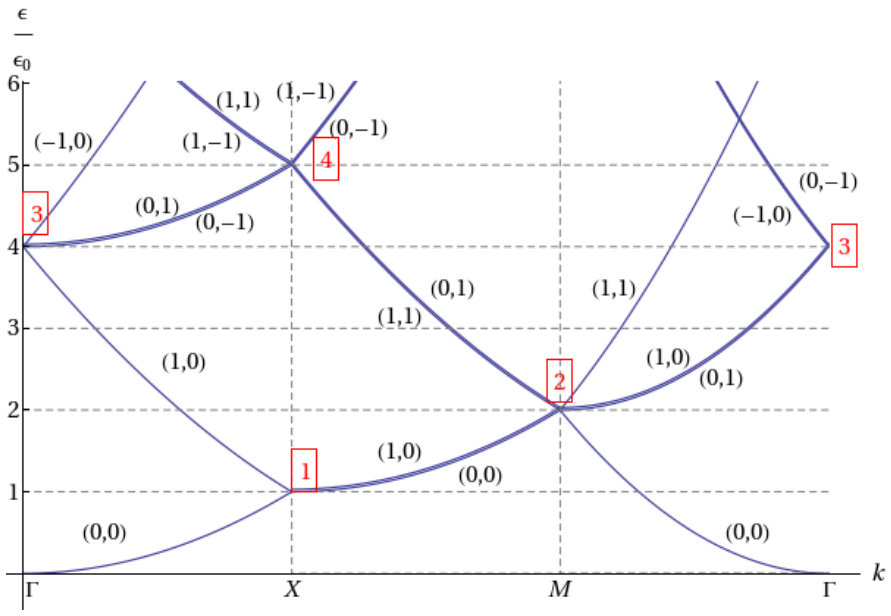
A diszperziós relációt az 9.2. ábrán ábrázoltuk.



9.1. ábra. A négyzetrács reciprok rácsa és első Brillouin-zónája.

nevezetes pont	metsző paraboloidok helyzete	egyrészecske-energia
Γ pont ($\mathbf{k}=(0,0)$)	$(0,0)$	$\varepsilon^0(\Gamma)=0$
	$(1,0);(0,1);(-1,0);(0-1)$	$\varepsilon^0(\Gamma)=4\varepsilon_0$
X pont ($\mathbf{k}=(\frac{\pi}{a},0)$)	$(0,0);(1,0)$	$\varepsilon^0(X)=\varepsilon_0$
	$(0,1);(0,-1);(1,-1);(1,1)$	$\varepsilon^0(X)=5\varepsilon_0$
M pont ($\mathbf{k}=(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a})$)	$(0,0);(1,0);(1,1);(0,1)$	$\varepsilon^0(M)=2\varepsilon_0$

9.1. táblázat. A Brillouin-zóna nevezetes pontjaiban található néhány degenerációs pont adatai.



9.2. ábra. Szabad elektronok diszperziós relációja a négyzetrács első Brillouin-zónájának nevezetes vonalai mentén.

9.2.3. Degeneráció felhasadása

A különböző degenerációs pontokban felírjuk a teljes Hamilton-operátort a degenerált altéren és diagonalizáljuk azt.

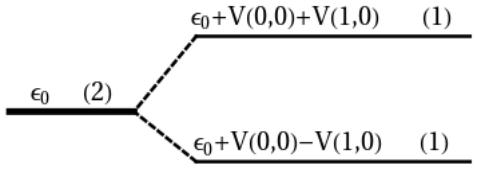
- X pontban a $(0,0)$ és $(1,0)$ paraboloidok metszik egymást $\varepsilon^0(X) = \varepsilon_0$ energiánál (a degeneráció foka itt 2) (az 9.2. ábrán ez az 1 pont)
  Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) & \tilde{V}(-1,0) \\ \tilde{V}(1,0) & \varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c(0,0) \\ c(1,0) \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} c(0,0) \\ c(1,0) \end{bmatrix}$$

  Szimmetria megfontolások miatt $\tilde{V}(1,0) = \tilde{V}(-1,0)$ és így

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) \pm \tilde{V}(1,0)$$

  szerint hasadnak fel a degenerált nívók gyenge rácsperiodikus potenciálban. Megjegyezzük, hogy $\tilde{V}(0,0)$ itt is csak az egyrészecske-energiák egy konstanssal történő eltolódását okozza.



9.3. ábra. A degeneráció felhasadása.

- M pontban a $(0,0)$, $(1,0)$, $(0,1)$ és $(1,1)$ paraboloidok metszik egymást $\varepsilon^0(M) = 2\varepsilon_0$ energiánál (a degeneráció foka itt 4) (az 9.2. ábrán ez a 2 pont)
  Schrödinger-egyenlet:

$$\begin{bmatrix} 2\varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) & \tilde{V}(-1,0) & \tilde{V}(0,-1) & \tilde{V}(-1,-1) \\ \tilde{V}(1,0) & 2\varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) & \tilde{V}(1,-1) & \tilde{V}(0,-1) \\ \tilde{V}(0,1) & \tilde{V}(-1,1) & 2\varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) & \tilde{V}(-1,0) \\ \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(0,1) & \tilde{V}(1,0) & 2\varepsilon_0 + \tilde{V}(0,0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c(0,0) \\ c(1,0) \\ c(0,1) \\ c(1,1) \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} c(0,0) \\ c(1,0) \\ c(0,1) \\ c(1,1) \end{bmatrix}$$

  A sajátérték egyenlet felírásánál segít, ha szem előtt tartjuk, hogy a Hamilton-operátor oszlopai rendre a $\mathbf{G} = (0,0); (1,0); (0,1); (1,1)$, sorai pedig a $\mathbf{G'} = (0,0); (1,0); (0,1); (1,1$ reciprokrács-vektorokhoz tartoznak, valamint ekkor a rácsperiodikus potenciál mátrixelemeinek értéke $\tilde{V}(\mathbf{G} - \mathbf{G'})$ lesz.

Legyen $\delta\varepsilon = \varepsilon - 2\varepsilon_0 - \tilde{V}(0,0)$! A potenciál Fourier-komponenseinek szimmetria tulajdonságait kihasználva

$$\begin{bmatrix} -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,0) & \tilde{V}(1,0) & \tilde{V}(1,1) \\ \tilde{V}(1,0) & -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(1,0) \\ \tilde{V}(1,0) & \tilde{V}(1,1) & -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,0) \\ \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(1,0) & \tilde{V}(1,0) & -\delta\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c(0,0) \\ c(1,0) \\ c(0,1) \\ c(1,1) \end{bmatrix} = 0$$

$$\delta\varepsilon^4 - 2\delta\varepsilon^2\left(2\tilde{V}(1,0)^2 + \tilde{V}(1,1)^2\right) - 8\delta\varepsilon\tilde{V}(1,0)^2\tilde{V}(1,1) + \tilde{V}(1,1)^4 - 4\tilde{V}(1,0)^2\tilde{V}(1,1)^2 = 0 \tag{9.1}$$

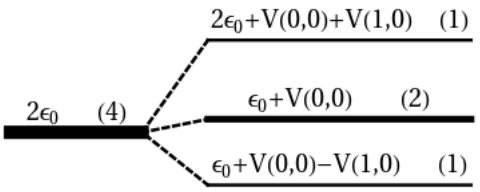
adódik. A negyedfokú (9.1) egyenlet megoldásai csak nagyon bonyolult alakban írhatóak fel, ezért csak speciális eseteket vizsgálunk. A $\tilde{V}(1,0) = 0$ esetet nem vizsgálhatjuk, mert ennek a komponensnek a jelenléte rögzíti a rácsállandót a-ban (ha nem lenne, akkor kisebb lenne a rácsállandó, magasabb szimmetriájú lenne a rács).
Ha $\underline{\tilde{V}(1,1) = 0}$, akkor a (9.1) egyenlet

$$\delta\varepsilon^4 - 4\delta\varepsilon^2\tilde{V}(1,0)^2 = 0$$

szerint egyszerűsödik, melynek megoldásai

$$\delta\varepsilon = 0 \quad \text{kétszeresen degenerált}$$

$$\delta\varepsilon = \pm 2\tilde{V}(1,0) \quad \text{nem degenerált}\,.$$



9.4. ábra. A degeneráció felhasadása az M pontban $V(1,1) = 0$ esetén.

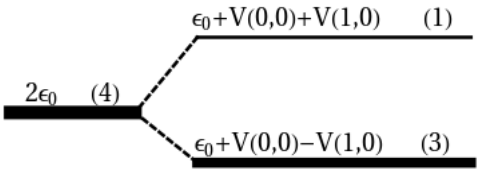
Ha $\underline{\tilde{V}(1,1) = \tilde{V}(1,0)}$, akkor a (9.1) egyenlet

$$\delta\varepsilon^4 - 6\delta\varepsilon^2\tilde{V}(1,0)^2 - 8\delta\varepsilon\tilde{V}(1,0)^3 - 3\tilde{V}(1,0)^4 = 0$$

szerint egyszerűsödik, melynek megoldásai

$$\delta\varepsilon = -\tilde{V}(1,0) \quad \text{háromszorosan degenerált}$$

$$\delta\varepsilon = 3\tilde{V}(1,0) \quad \text{nem degenerált.}$$



9.5. ábra. A degeneráció felhasadása az M pontban $\tilde{V}(1,1) = \tilde{V}(1,0)$ esetén.

Hangsúlyozzuk azonban, hogy a köbös szimmetria nem követeli meg a $V(1,1) = V(1,0)$ egyenlőséget, ezért a degeneráció ebből adódó növekedését "véletlen" degenerációnak nevezzük, szemben a szimmetria által megkövetelt „lényeges” degenerációval.

- Γ pontban a $(1,0)$, $(0,1)$, $(-1,0)$ és $(0,-1)$ paraboloidok metszik egymást $\varepsilon^0(\Gamma) = 4\varepsilon_0$ energiánál (a degeneráció foka itt 4) (az 9.2. ábrán ez a 3 pont)
  A Schrödinger-egyenlet a korábbiakhoz hasonló módon írható fel.

$$\begin{bmatrix} -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(2,0) & \tilde{V}(1,1) \\ \tilde{V}(1,1) & -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(2,0) \\ \tilde{V}(2,0) & \tilde{V}(1,1) & -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,1) \\ \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(2,0) & \tilde{V}(1,1) & -\delta\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c(1,0) \\ c(0,1) \\ c(-1,0) \\ c(0,-1) \end{bmatrix} = 0$$

  Ha $\tilde{V}(1,0) \neq 0$, de az összes többi Fourier-komponens zérus, akkor $\delta\varepsilon = 0$, vagyis nincs felhasadás a gyenge potenciál hatására.

- X pontban a $(0,1)$, $(0,-1)$, $(1,-1)$ és $(1,1)$ paraboloidok metszik egymást $\varepsilon^0(X) = 5\varepsilon_0$ energiánál (a degeneráció foka itt 4) (az 9.2. ábrán ez a 4 pont)
  A Schrödinger-egyenlet a korábbiakhoz hasonló módon írható fel.

$$\begin{bmatrix} -\delta\varepsilon & \tilde{V}(2,0) & \tilde{V}(2,1) & \tilde{V}(1,0) \\ \tilde{V}(2,0) & -\delta\varepsilon & \tilde{V}(1,0) & \tilde{V}(2,1) \\ \tilde{V}(2,1) & \tilde{V}(1,0) & -\delta\varepsilon & \tilde{V}(2,0) \\ \tilde{V}(1,0) & \tilde{V}(2,1) & \tilde{V}(2,0) & -\delta\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c(0,1) \\ c(0,-1) \\ c(1,-1) \\ c(1,1) \end{bmatrix} = 0$$

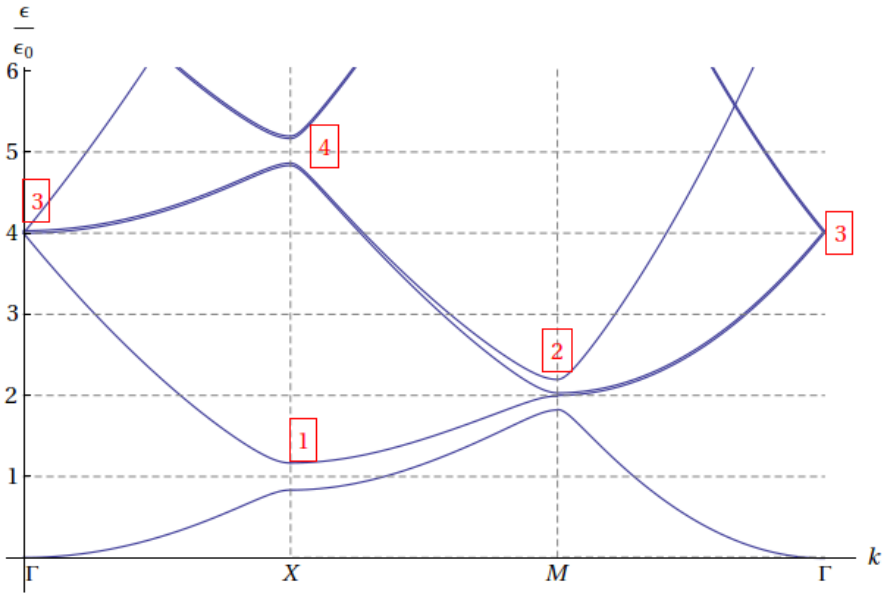
  Ha $\tilde{V}(1,0) \neq 0$, de az összes többi Fourier-komponens zérus, akkor a fenti sajátérték probléma a

$$\delta\varepsilon^4 - 2\tilde{V}(1,0)^2\delta\varepsilon^2 + \tilde{V}(1,0)^4 = 0$$

  egyenletre vezet, melynek megoldásai $\delta\varepsilon = \pm\tilde{V}(1,0)$ kétszeresen degeneráltak.

A degenerált vonalak legfeljebb kétszeresen degeneráltak, ekkor az X pontban ε_0 energiánál bemutatott számolás alkalmazható. Bármelyik degenerációs pontban a Schrödinger-egyenletben a Hamilton-operátor mátrixa önadjungált lesz, azaz diagonalizálható (akár numerikusan is beprogramozható).

A 9.6. ábrán látható a kétdimenziós négyzetrács elektronszerkezete gyenge rácsperiodikus potenciál esetén, amennyiben $\tilde{V}(1,0) \neq 0$, de a többi Fourier-komponens mind zérus.



9.6. ábra. Az elektron spektrum közel szabad elektron közelítésben négyzetrácson. Az ábrázolásnál $V(1,0) = \varepsilon_0/6$.

9.2.4. Példa feladat közel szabad elektron közelítésre három dimenzióban

Háromdimenziós elektronok a rácsállandójú egyszerű köbös rács gyenge periodikus potenciáljában mozognak.
a) Adjuk meg az első Brillouin-zóna alakját és méretét!
b) Ha eltekintenénk a rácsperiodikus potenciáltól (szabad elektron kép), akkor mekkora lenne a Fermi-hullámszám és hogy nézne ki a Fermi felület abban az esetben, amikor minden rácspontra 2 elektron jut!
c) Hogyan módosulnak a b) pont eredményei ha figyelembe vesszük a rácsperiodikus potenciált?
Megoldás:
a) Az első Brillouin-zóna egy kocka, melynek térfogata

$$V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3.$$

b) Ebben a részfeladatban eltekintünk a perturbáció hatásától. A rácsnak itt csak annyi szerepe van, hogy azon keresztül van az elektronsűrűség megadva. A rendszerben elemi cellánként 2, így összesen $N_e = 2N$ részecske van. N az elemi cellák száma. A köbös rácsban az elemi cella térfogata $V_c = a^3$. A Fermi-hullámszám segítségével

$$N_e = 2\frac{V}{(2\pi)^3}\int^{k_F} \mathrm{d}^3k = \frac{NV_c}{4\pi^3}\int_0^{k_F} 4\pi k^2\,\mathrm{d}k = \frac{Na^3}{3\pi^2}k_F^3$$

$$2N = \frac{N}{3\pi^2}(ak_F)^3$$

$$ak_F = (6\pi^2)^{1/3}.$$

Az első képletben a 2-es faktor a spindegenerációból fakad. A Fermi felület ebben az esetben egy gömb lesz, melynek sugara $k_F = (6\pi^2)^{1/3}a^{-1}$.
c) A rácsperiodikus potenciál hatására a Fermi-felület nem egy gömb lesz, hanem egy anizotróp háromdimenziós felület. Ezt az objektumot nem jellemezhetjük egy jól meghatározott Fermi-hullámszámmal.

9.3. Házi feladatok

16. házi feladat

Tekintsük az a rácsallandójú szabályos négyzetrácsot!

a) Rajzold fel a szabad elektronok sávszerkezetét a $\Gamma(0,0)-X(\pi/a,0)-M(\pi/a,\pi/a)-\Gamma(0,0)$ vonal mentén a $0 \leqq \varepsilon \leqq 7\hbar^2\pi^2/2ma^2$ energia tartományban! Ezen a ponton tekints el attól, hogy a rácsszerkezetért felelõs periodikus potenciál feloldhatja a sávok közötti degenerációkat. Tüntesd föl, hogy az egyes hullámszám térbeli pontokban/vonalakon hányszorosan degeneráltak a megvalósuló energiaértékek és indexeld az egyes sávokat a hozzájuk tartozó reciprokrács-vektorokkal!

b) Vizsgáld meg, hogy a Γ pontban $\varepsilon = 4\hbar^2\pi^2/2ma^2$-nál kialakuló degeneráció hogyan hasad fel, ha a periodikus potenciálnak csak az $\tilde{U}(2\pi/a,0) = \tilde{U}(-2\pi/a,0) = \tilde{U}(0,2\pi/a) = \tilde{U}(0,-2\pi/a) \triangleq U_1$ és a $\tilde{U}(4\pi/a,0) = \tilde{U}(-4\pi/a,0) = \tilde{U}(0,4\pi/a) = \tilde{U}(0,-4\pi/a) \triangleq U_2$ Fourier komponensei nem zérusok! Számold ki az energia felhasadások nagyságát és határozd meg a sajátállapotokat is!

\+ Vizsgáld meg a felhasadásokat a $\Gamma - X - M - \Gamma$ vonal mentén, ha továbbra is csak a fönti U_1 és U_2 Fourier együtthatók különböznek nullától!

10. fejezet

Elektronok energiaspektruma szoros kötésű közelítésben

Ebben a fejezetben a szilárdtestbeli elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben számoljuk ki. A szoros kötésű közelítés kovalens kötésű anyagok sávszerkezetének meghatározására szokás használni. Szilárd testben a nem kölcsönható elektronok egyrészecske Hamilton-operátora

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\mathbf{R}} V_{\text{atom}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \tag{10.1}$$

alakban írható fel, ahol $V_{\text{atom}}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ az $\mathbf{R}$ pontba helyezett atom (atommag és a törzselektronok) potenciáljával közelíthető. A teljes potenciál invariáns a rácsvektorokkal történő eltolásra, ezért érvényes a Bloch-tétel, amely szerint az elektronok sajátállapotait a $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Bloch-függvényekkel jellemezhetjük, melyekre

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,.$$

A Bloch-függvények mindig felírhatók

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

alakban, hiszen

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_0) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\varphi_n(\mathbf{r} + \mathbf{R}_0 - \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}'+\mathbf{R}_0)}\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}') =$$

$$= e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_0}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})}_{\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_0}\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

A $\varphi_n(\mathbf{r})$ függvényeket Wannier-függvényeknek nevezzük, melyek jól lokalizáltak, vagyis nagy távolságokra exponenciálisan lecsengenek. Szoros kötésű közelítésben a Wannier-függvényeket a $\varphi_a(\mathbf{r})$ atomi hullámfüggvényekkel közelítjük, melyekre

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{atom}}(\mathbf{r})\right)}_{H_{\text{atom}}} \varphi_a(\mathbf{r}) = \varepsilon_a \varphi_a(\mathbf{r}).$$

10.1. Szoros kötésű közelítés egyetlen atomi pálya figyelembe vételével

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk először elemi cellánként csak egyetlen atomi pályát. Ekkor képezhetjük a

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \tag{10.2}$$

Bloch-függvényeket, melyeket később $|\mathbf{k}\rangle$-val is jelölünk. Megjegyezzük, hogy a (10.2) függvények nem sajátfüggvényei a (10.1) Hamilton-operátornak és nem feltétlenül normáltak. Ezért az egyrészecske diszperziós reláció

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}\rangle}{\langle \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle}$$

alakban írható. A szoros kötésű közelítésnél feltételezzük, hogy a $\Psi_{\mathbf{k}}$ függvények jól közelítik a Hamilton-operátor sajátfüggvényeit, így a fenti képlet a spektrumot adja vissza közelítőleg. A nevezőre azért van szükség, mert a (10.2) módon feltételezett Bloch-függvény nem feltétenül normált.

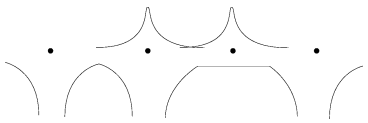
$$\langle \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle = \int \mathrm{d}^d r \Psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^d r \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \varphi^*_a(\mathbf{r}-\mathbf{R}')\varphi_a(\mathbf{r}-\mathbf{R}) =$$

$$= \int \mathrm{d}^d r \, \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \varphi^*_a(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{R}')\varphi_a(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}^d r \, \varphi^*_a(\mathbf{r}+\mathbf{R})\varphi_a(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \alpha(\mathbf{R})$$

A formulában

$$\alpha(\mathbf{R}) = \int \mathrm{d}^d r \, \varphi^*_a(\mathbf{r}+\mathbf{R})\varphi_a(\mathbf{r}),$$

melyre $\alpha(0) = 1$, de a további tagok $|\mathbf{R}|$ növelésével exponenciálisan csökkennek.



A diszperziós reláció számlálójában található várható értéket az alábbiak szerint fejthetjük ki.

$$\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{N}\int \mathrm{d}^d r \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')}\varphi_a^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}')H(\mathbf{r})\varphi_a(\mathbf{r}-\mathbf{R}) =$$

$$= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}^d r\, \varphi_a^*(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\mathbf{R}'} V_{\mathrm{atom}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}') \right) \varphi_a(\mathbf{r})$$

A potenciális energiát

$$\sum_{\mathbf{R}'} V_{\mathrm{atom}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}') = V_{\mathrm{atom}}(\mathbf{r}) + \Delta V(\mathbf{r})$$

szerint két részre bontjuk, ahol $\Delta V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}'\neq 0} V_{\mathrm{atom}}(\mathbf{r}-\mathbf{R}')$. Ezzel

$$\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}^d r\, \varphi_a^*(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \Bigg(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\mathrm{atom}}(\mathbf{r})}_{H_{\mathrm{atom}}} + \Delta V(\mathbf{r}) \Bigg) \varphi_a(\mathbf{r}) =$$

$$= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}^d r\, \varphi_a^*(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \left(\varepsilon_a + \Delta V(\mathbf{r})\right) \varphi_a(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left(\varepsilon_a \alpha(\mathbf{R}) + \beta(\mathbf{R})\right)$$

adódik, ahol

$$\beta(\mathbf{R}) = \int \mathrm{d}^d r\, \varphi_a^*(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \Delta V(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}).$$

Az energia spektrum

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} (\varepsilon_a \alpha(\mathbf{R}) + \beta(\mathbf{R}))}{\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \alpha(\mathbf{R})} = \varepsilon_a + \frac{\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \beta(\mathbf{R})}{\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \alpha(\mathbf{R})}$$

szerint írható. Eddig csak azt a közelítést tettük, hogy a Wannier-függvények éppen az atomi hullámfüggvények. Ha még azt is kihasználjuk, hogy az α és β faktorok $|\mathbf{R}|$ növelésével exponenciálisan csökkennek, akkor vezető rendben a spektrum

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \underbrace{\varepsilon_a + \beta(0)}_{\varepsilon_0} + \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta}\beta(\delta) = \varepsilon_0 + \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta}\beta(\delta) \tag{10.3}$$

szerint tovább egyszerűsödik. Itt δ az elsőszomszéd cellák rácsvektorait jelöli. Legtöbbször $\beta(0)$ nagyon kicsi, ezért $\varepsilon_0 \approx \varepsilon_a$.

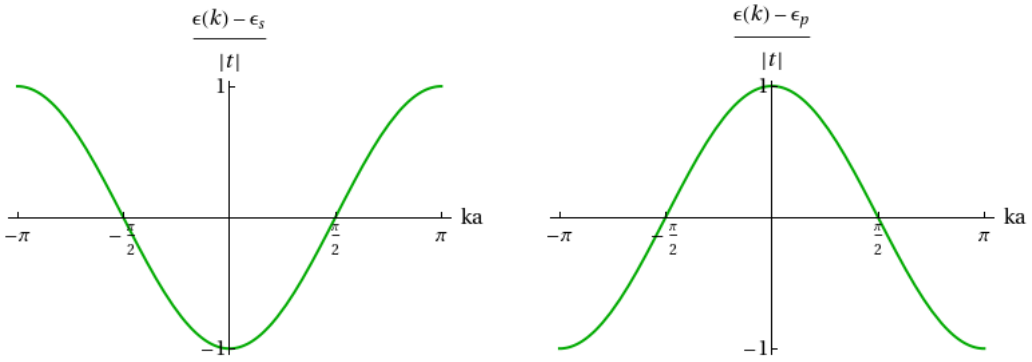
A szoros kötésű közelítés akkor érvényes, ha $\beta(\delta) \ll \varepsilon_0$, amely kis sávszélességű anyagok esetén teljesül.

Megjegyezzük, hogy $\alpha(-\mathbf{R}) = \alpha^*(\mathbf{R})$ és $\beta(-\mathbf{R}) = \beta(\mathbf{R})^*$, vagyis a (10.3) kifejezés valós.

10.1.1. Spektrum s pályák esetén egy dimenzióban

Ha a vezetési jelenségek leírásához atomonként egy s pályát veszünk figyelembe, akkor $\varphi_{\mathrm{s}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathrm{s}}(-\mathbf{r})$ és $\Delta V < 0$ miatt $\beta(a) \equiv t < 0$, vagyis a spektrum

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathrm{s}} - |t| \sum_{+a,-a} e^{ika} = \varepsilon_{\mathrm{s}} - 2|t| \cos ka\,.$$



10.1. ábra. Diszperziós reláció szoros kötésű közelítésben s és p pályák esetén.

10.1.2. Spektrum p pályák esetén egy dimenzióban

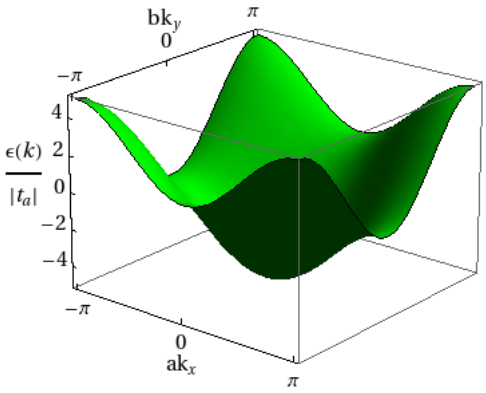
Ha egy egydimenziós rendszerben p_x pályákat veszünk figyelembe, akkor $\varphi_{\mathrm{p}}(\mathbf{r}) = -\varphi_{\mathrm{p}}(-\mathbf{r})$ miatt $\beta(a) \equiv t > 0$, a spektrum pedig

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathrm{p}} + 2|t| \cos ka\,.$$

10.1.3. Kétdimenziós derékszögű (tetragonális) rács

Egy kétdimenziós tetragonális rácsban az átfedési integrálok a két különböző irányban legyenek $t_a < 0$ és $t_b < 0$, valamint $\varepsilon_0 \approx 0$. Ekkor a spektrum

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2|t_a| \cos k_x a - 2|t_b| \cos k_y b$$



10.2. ábra. Diszperziós reláció szoros kötésű közelítésben kétdimenziós tetragonális rácsban. Az ábrázolásnál a $|t_b|/|t_a|$ arányt $1,5$-nek vettük.

alakban írható, melyet az 10.2. ábrán ábrázoltunk.
Tetszőleges módon kiszámolt diszperziós reláció alapján be lehet vezetni (általános definíció) a

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}}$$

kvázirészecske sebességet és az

$$\left(\hat{m}^{-1}(\mathbf{k})\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}$$

effektív tömegtenzort.

Kis betöltés esetén a részecskék a kis energiájú, vagyis a $\mathbf{k} = 0$-hoz közeli hullámszámú állapotokat töltik be. A $\mathbf{k} = 0$ körül sorfejtve

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx -2|t_a|\left(1 - \frac{(k_x a)^2}{2}\right) - 2|t_b|\left(1 - \frac{(k_y b)^2}{2}\right) = -2(|t_a| + |t_b|) + |t_a|k_x^2 a^2 + |t_b|k_y^2 b^2$$

adódik. Így a kvázirészecske csoportsebesség

$$\begin{pmatrix} v_x(\mathbf{k}) \\ v_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar}\begin{pmatrix} 2|t_a|a^2 k_x \\ 2|t_b|b^2 k_y \end{pmatrix}$$

és az effektív tömegtenzor

$$\hat{m}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2|t_a|a^2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2|t_b|b^2} \end{pmatrix}.$$

Megjegyezzük, hogy ha egy rendszerben kisebb az átfedési integrál, akkor az fizikailag azt jelenti, hogy az elektronok nehezebben tudnak mozogni a rácsban. A fenti eredményünkön látható, hogy kisebb átfedési integrál esetén az effektív tömeg növekszik, amely szintén tükrözi azt, hogy a részecskék nehezebben mozognak a rácsban.

Nagy betöltések esetén (teljes betöltés közelében) az effektív tömeg negatív lesz (lyukak).

10.2. Szoros kötésű közelítés több atom esetén

Szoros kötésű közelítésben több atomot is figyelembe vehetünk. A közelítés kiterjeszthető atomonként több atomi pályára is, de az egyszerűség kedvéért itt most csak atomonként egy pályát tekintünk. A különböző atomokat b-vel indexeljük: $\varphi_b(\mathbf{r})$, melyekre

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_b(\mathbf{r})\right)\varphi_b(\mathbf{r}) = \varepsilon_b\varphi_b(\mathbf{r})$$

teljesül. Az atomi hullámfüggvények segítségével definiálhatjuk a

$$\Psi_{b\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{kR}}\varphi_b(\mathbf{r}-\mathbf{R})$$

függvényeket. A Hamilton-operátor

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\mathbf{R}b} V_b(\mathbf{r}-\mathbf{R})$$

sajátállapotait

$$\Phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_b c_{nb}(\mathbf{k})\Psi_{b\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

alakban keressük valamilyen $c_{nb}(\mathbf{k})$ együtthatókkal (n a lehetséges megoldásokat indexeli adott $\mathbf{k}$ esetén). A Schrödinger-egyenlet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\mathbf{R}''b''} V_{b''}(\mathbf{r}-\mathbf{R}'')\right)\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{kR}}\varphi_b(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{kR}}\varphi_b(\mathbf{r}-\mathbf{R})$$

alakban írható. Szorozzuk be az egyenlet mindkét oldalát balról, skalárisan $\varphi_{b'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}')$-vel! Ekkor

$$\int \mathrm{d}V\varphi^*_{b'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\mathbf{R}''b''} V_{b''}(\mathbf{r}-\mathbf{R}'')\right)\sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{kR}}\varphi_b(\mathbf{r}-\mathbf{R}) =$$

$$= \varepsilon_n(\mathbf{k}) \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}') \sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \varphi_b(\mathbf{r}-\mathbf{R})$$

[változócsere: $\mathbf{r}-\mathbf{R} \to \mathbf{r}$]

$$\sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{R}') \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\mathbf{R}''b''} V_{b''}(\mathbf{r}-\mathbf{R}'') \right) \varphi_b(\mathbf{r}) =$$

$$= \varepsilon_n(\mathbf{k}) \sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{R}') \varphi_b(\mathbf{r})$$

[áttérés az összegzésben $\mathbf{R}$-ről $\mathbf{R}-\mathbf{R}'$-re, illetve potenciális energia szétválasztása]

$$\sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left[\varepsilon_b \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \varphi_b(\mathbf{r}) + \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \Delta V_b(\mathbf{r}) \varphi_b(\mathbf{r}) \right] =$$

$$= \varepsilon_n(\mathbf{k}) \sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \varphi_b(\mathbf{r})$$

ahol $\Delta V_b(\mathbf{r}) = (\sum_{b'\mathbf{R}} V_{b'}(\mathbf{r}-\mathbf{R})) - V_b(\mathbf{r})$. Definiáljuk a

$$\alpha_{b'b}(\mathbf{R}) = \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \varphi_b(\mathbf{r}) \quad \text{és} \quad \beta_{b'b}(\mathbf{R}) = \int \mathrm{d}V \varphi^*_{b'}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \Delta V_b(\mathbf{r}) \varphi_b(\mathbf{r})$$

függvényeket. Ezekkel behelyettesítve

$$\sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left(\varepsilon_b \alpha_{b'b}(\mathbf{R}) + \beta_{b'b}(\mathbf{R}) \right) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \sum_{b\mathbf{R}} c_{nb}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \alpha_{b'b}(\mathbf{R})$$

adódik. Definiáljuk továbbá a

$$\alpha_{b'b}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \alpha_{b'b}(\mathbf{R}) \quad \text{és} \quad \beta_{b'b}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \beta_{b'b}(\mathbf{R})$$

mennyiségeket, melyekkel a Schrödinger-egyenlet

$$\sum_{b} \left(\varepsilon_b \alpha_{b'b}(\mathbf{k}) + \beta_{b'b}(\mathbf{k}) \right) c_{nb}(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \sum_{b} \alpha_{b'b}(\mathbf{k}) c_{nb}(\mathbf{k})$$

alakban írható fel. A $h_{0b'b} = \varepsilon_b \delta_{b'b}$ jelöléssel a

$$\left(\hat{\alpha}(\mathbf{k}) \hat{h}_0 + \hat{\beta}(\mathbf{k}) \right) \mathbf{c}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \hat{\alpha}(\mathbf{k}) \mathbf{c}_n(\mathbf{k})$$

egyenletre jutunk. Definiáljuk azt az invertálható $\hat{\gamma}(\mathbf{k})$ mátrixot, melyre $\hat{\gamma}(\mathbf{k})^+ \hat{\gamma}(\mathbf{k}) = \hat{\alpha}(\mathbf{k})$. Így a fenti egyenletet

$$\hat{\gamma}(\mathbf{k})^{+\,-1} \hat{h}(\mathbf{k}) \hat{\gamma}(\mathbf{k})^{-1} \mathbf{d}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \mathbf{d}_n(\mathbf{k})$$

szerint írhatjuk fel, ahol $\mathbf{d}_n(\mathbf{k}) = \hat{\gamma}(\mathbf{k})\mathbf{c}_n(\mathbf{k})$ és $\hat{h}(\mathbf{k}) = \hat{\alpha}(\mathbf{k})\hat{h}_0 + \hat{\beta}(\mathbf{k})$. Az egyenlet bal oldalán található mátrix önadjungált, sajátértékei valósak. A sajátértékek megadják az egyrészecske-spektrumokat. A képletekben $\hat{}$ a mátrixokat jelöli. Megjegyezzük, hogy annyi diszperziós ágat kapunk, ahány atomot egy elemi cellában figyelembe vettünk.

Az egy atomi pályás esethez hasonlóan itt is további egyszerűsítésre van lehetőség, ha figyelembe vesszük az atomi hullámfüggvények lokalizáltságát. Ekkor ugyanis

$$\alpha_{b'b}(\mathbf{k}) \approx \delta_{b'b} \qquad \text{és} \qquad \beta_{b'b}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta}\beta_{b'b}(\delta)$$

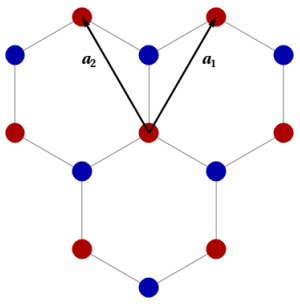
jó közelítéssel teljesül, ahol a δ-ra történő összegzés a figyelembe vett első- vagy másodszomszédokon fut végig. Ebben az esetben a Schrödinger-egyenlet a

$$\left(\hat{h}_0 + \hat{\beta}(\mathbf{k})\right)\mathbf{c}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\mathbf{c}_n(\mathbf{k})$$

sajátérték problémára vezet.

10.2.1. Grafén

A grafén egy kétdimenziós, szén atomokból álló anyag, melynek atomjai hatszög rácsba rendeződnek. Az elemi cella két atomot tartalmaz, melyeket A-val és B-vel szokás jelölni. Az elemi rácsvektorok egy háromszögrácsot feszítenek ki (ld. 10.3. ábra).



10.3. ábra. Grafén rács.

A reciprokrács szintén egy háromszög rács, melyben az első Brillouin-zóna egy hatszög. A transzport jelenségekben atomonként csak egy elektron vesz részt, amely p_z állapotban van (a z-tengely a grafén síkjára merőleges irányba mutat). A többi elektron a rácsot összetartó kötésekben vesz részt. Elemi cellánként tehát összesen két (egy A atomhoz tartozó és egy B atomhoz tartozó) atomi pályát kell figyelembe vennünk a vezetési jelenségek leírásában. Ezeknek az atomi pályáknak az energiája zérusnak tekinthető. Ez azért tehető meg, mert az egyrészecske-energiákat egy adott energiával eltolhatjuk anélkül, hogy az befolyásolná a rendszer termodinamikai viselkedését. Grafénben minden

egyrészecske-energiát úgy tolunk el, hogy a ε_0, amelyet szokás site energiának nevezni, zérus legyen.
Szoros kötésű közelítésben, ha csak elsőszomszéd átfedéseket tekintünk, akkor a

$$\beta_{AB}(0) = \beta_{BA}(0) = \beta_{AB}(-\mathbf{a}_1) = \beta_{BA}(\mathbf{a}_1) = \beta_{AB}(-\mathbf{a}_2) = \beta_{BA}(\mathbf{a}_2) = t$$

átfedési integrálokat tartjuk meg. Az atomi pályák elhelyezkedése miatt $t < 0$.

$$\hat{\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & tf^*(\mathbf{k}) \\ tf(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix},$$

ahol

$$f(\mathbf{k}) = 1 + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}.$$

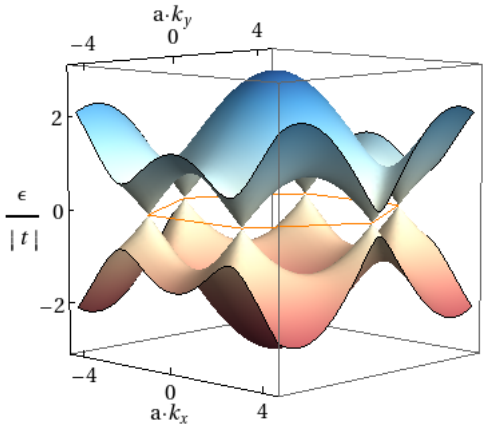
A Schrödinger-egyenlet így

$$\begin{pmatrix} 0 & tf^*(\mathbf{k}) \\ tf(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A(\mathbf{k}) \\ c_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \varepsilon(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_A(\mathbf{k}) \\ c_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$

mely alapján a két sáv energiaspektruma

$$\varepsilon_\pm(\mathbf{k}) = \pm|t||f(\mathbf{k})| = \pm|t|\sqrt{3 + 2\cos\mathbf{k}\mathbf{a}_1 + 2\cos\mathbf{k}\mathbf{a}_2 + 2\cos\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}.$$

A diszperziós reláció a 10.4. ábrán látható.



10.4. ábra. Grafén diszperziós relációja.

10.2.2. Bór-nitrid

A bór-nitridnek azt a módosulatát vizsgáljuk, amelyben a grafénhoz hasonlóan egy kétdimenziós méhsejtrácsba rendeződnek az atomok. A kristályszerkezet tehát ugyanaz,

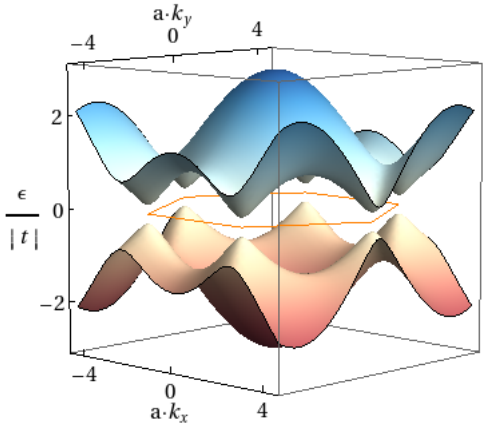
mint a 10.3. ábrán. Míg a grafén esetén egy elemi cella két szén atomot tartalmazott, melyek site energiája megegyezik (ezt a site energiát 0-nak tekintettük), addig a bór-nitrid esetén az elemi cellában egy B és egy N atomot találhatunk, melyek site energiája különböző. Az egyrészecske-energiákat úgy toljuk el, hogy az ε_A és ε_B site energiákra $(\varepsilon_A + \varepsilon_B)/2 = 0$ legyen. Így a diszperziós relációt meghatározó $\hat{\beta}$ mátrix az alábbiak szerint írható.

$$\hat{\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & tf^*(\mathbf{k}) \\ tf(\mathbf{k}) & \varepsilon_B \end{pmatrix}$$

Diagonalizálás után megkaphatjuk a diszperziós relációt.

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\Delta^2 + (|t||f(\mathbf{k})|)^2} \qquad \Delta = \frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{2}$$

A bór-nitrid egyrészecske-spektrumában nyílik egy gap a graféneához képest. A kémiai potenciál pont ebbe a tiltott sávba esik, ezért a bór-nitrid egy szigetelő anyag.

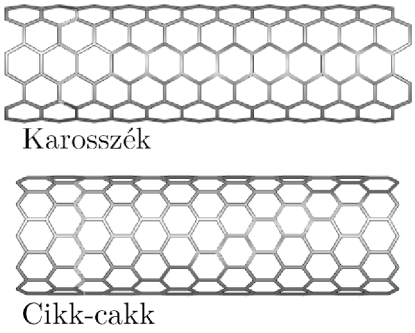


10.5. ábra. Bór-nitrid diszperziós relációja.

10.2.3. Szén nanocsövek

A szén nanocsövek egy grafén sík feltekert változatai. A nanocső tulajdonságai nagyban függnek a feltekerés irányától: többek között ezen múlik, hogy a nanocső vezető vagy sávszigetelő lesz-e. Az $\mathbf{a}_1$ irány mentén feltekerve kapjuk a cikk-cakk nanocsövet, az $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ irány mentén pedig a karosszék szerkezetű nanocsövet, ld. a 10.6. ábrát. E két fajta nanocsőnek van tükrözési szimmetriája. A grafén más irányok mentén is csőbe sodorható; ezekben a szerkezetekben hiányzik a tükörsík (királisak).

A nanocső elektrongerjesztési spektruma könnyen meghatározható a grafén elektron-szerkezetének ismeretében. A feltekerés iránya mentén az elektronok hullámfüggvényének



10.6. ábra. A karosszék és a cikk-cakk szén nanocső konfiguráció.

periodikus határfeltételt kell kielégítenie. Mivel a cső $L_\perp$ kerülete csak néhány atomtávolságnyi, ez a feltétel kvantálttá teszi a feltekerés irányára merőleges hullámszámokat: $\mathbf{k}_\perp$ csak $2\pi/L_\perp$ egész számú többszöröse lehet. A spektrumot a Brillouin-zóna ezen feltételnek eleget tevő vonalai mentén kapjuk a grafén spektrumából, lásd az előző feladatot. (A grafénsík görbülésének a spektrumra gyakorolt hatása jó közelítéssel elhanyagolható.)

A karosszék szerkezetű nanocső esetén a hullámfüggvényekre vonatkozó kvantálási feltétel $\psi(\mathbf{r} + N(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)) = \psi(\mathbf{r})$, ahol N a feltekerés irányában lévő cellák száma. A nanocső kerülete $L_\perp = N|\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2| = Na\sqrt{3}$, így a kvantálási feltétel

$$k_1 + k_2 = n\,\frac{2\pi}{Na} = n\,\frac{2\pi\sqrt{3}}{L_\perp}. \tag{10.4}$$

A cső irányában eső $k_\parallel = k_1 - k_2$ hullámszámokkal kifejezve a $k_\perp = 0$-hoz tartozó spektrum

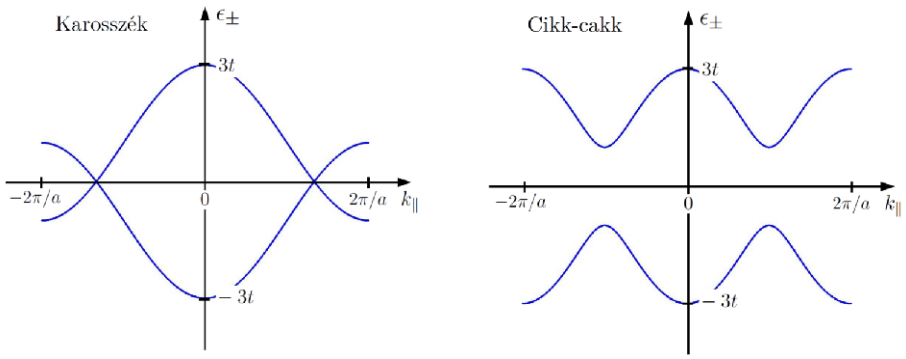
$$\varepsilon_\pm(k_\parallel) = \pm|t|\sqrt{3 + 4\cos(k_\parallel a/2) + 2\cos(k_\parallel a)}. \tag{10.5}$$

A spektrum tartalmaz 0 energiás gerjesztéseket, így ez a nanocső fémes lesz. (A grafénben és a szén nanocsövekben ugyanis minden szénatom egy elektront ad a vezetési sávba, így a Fermi-energia egzaktul 0 energiánál lesz.)

Hasonlóan kapjuk a cikk-cakk nanocső $k_\perp = 0$-hoz tartozó tiltott sávval rendelkező spektrumát.

$$\varepsilon_\pm(k_\parallel) = \pm|t|\sqrt{5 + 4\cos(k_\parallel a)}. \tag{10.6}$$

Nulla energiás gerjesztéseket csak bizonyos N értékekre találhatunk, a $k_\perp \neq 0$ vonalak mentén. Így a cikk-cakk nanocső általában szigetelő lesz.



10.7. ábra. A karosszék és a cikk-cakk konfiguráció spektruma $k_\perp = 0$-ra.

10.3. Példa feladatok szoros kötésű közelítésre

10.3.1. Effektív tömeg és Fermi-felület négyzetrácsban

Az a rácsállandójú négyzetrács egy sávjának diszperziós relációja szoros kötésű közelítésben

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2t\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right). \qquad t > 0$$

a) Mekkora az elektronok effektív tömege a sáv alján, illetve a sáv tetején? Hogyan néz ki az effektív tömeg tenzor félig töltött sáv esetén?
b) Rajzoljuk fel a Fermi-felület alakját a fenti három esetre (közel üres sáv, félig töltött sáv, majdnem teljesen betöltött sáv)!
Megoldás:
a) A spektrum alapján ki lehet számolni az

$$\left[\mathbf{m}^{-1}(\mathbf{k})\right]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}$$

effektív tömeg tenzort. A diszperziós relációban $t > 0$, így a sáv alja a kis, $\mathbf{k} = 0$-hoz közeli hullámszámoknál van, a sáv teteje pedig a Brillouin-zóna szélénél, $\mathbf{k} = (\pi/a; \pi/a)$-hoz közeli hullámszámoknál van. A sáv aljánál

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_0 - 2t + ta^2k^2$$

és az effektív tömeg tenzor

$$\mathbf{m}(\mathbf{k}=0) = \frac{\hbar^2}{2ta^2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

pozitív. A sáv tetejénél

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_0 + 2t - ta^2\Delta k^2,$$

ahol $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - (\pi/a; \pi/a)$ és az effektív tömeg tenzor

$$\mathbf{m}(\mathbf{k} = (\pi/a; \pi/a)) = -\frac{\hbar^2}{2ta^2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

negatív, így lyukgerjesztésekről beszélünk.
b) A sáv aljánál

$$\varepsilon_F = \varepsilon_0 - 2t + ta^2(k_x^2 + k_y^2)$$

a Fermi-felület egy kör a $\mathbf{k} = 0$ pont körül. A sáv tetejénél

$$\varepsilon_F = \varepsilon_0 + 2t - ta^2(\Delta k_x^2 + \Delta k_y^2)$$

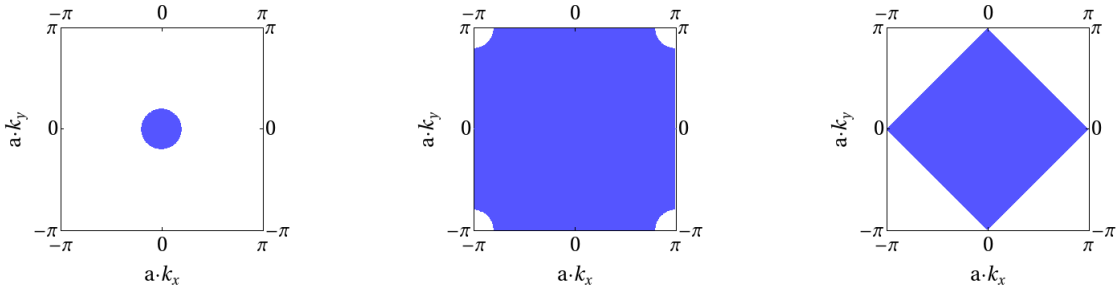
szintén egy kör a $\mathbf{k} = (\pi/a; \pi/a)$ pont körül. Félig töltött esetben a Fermi-energia ε_0-nál van. Így

$$2t(\cos k_x a + \cos k_y a) = 0$$

$$\cos\left(\frac{k_x + k_y}{2}a\right)\cos\left(\frac{k_x - k_y}{2}a\right) = 0$$

$$\frac{k_x \pm k_y}{2}a = \pm\pi$$

a Fermi-felület egy négyzet lesz.



10.8. ábra. Fermi-felület kis betöltés esetén, majdnem teljesen és félig töltött esetben.

10.3.2. Vezetőképesség négyzetrácsban

Egy s atomi pályákból felépülő kétdimenziós négyzetrácsban az átfedési integrál értéke az élszomszédok között t_1, az átlószomszédok között t_2 ($t_1, t_2 < 0$).

a) Írd fel a diszperziós relációt szoros kötésű közelítésben!

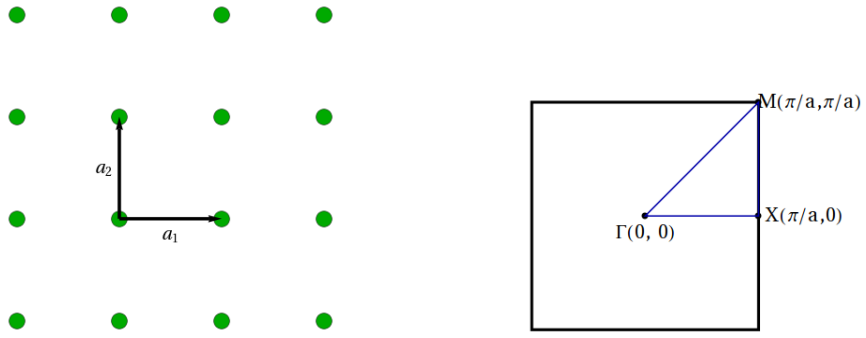
b) Ábrázold vázlatosan a diszperziós relációt az elsõ Brillouin-zóna nevezetes pontjait összekötõ $\Gamma - X - M - \Gamma$ egyenesek mentén! Mekkora a sávszélesség?

c) Számítsd ki az m_{ij}^{-1} effektív tömeg tenzort kis betöltés esetén!

d) Számold ki az m_{ij}^{-1} effektív tömeg tenzort a $|t_1| \gg |t_2|$ majdnem teljesen töltött sáv esetén! Ugyanebben az esetben határozd meg a σ_{ij} vezetõképesség tenzort relaxációs idő közelítésben és tegyük fel, hogy a relaxációs idő nem függ a hullámszámtól!

Megoldás:
Az elemi rácsvektorok:

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$



10.9. ábra. Négyzetrács és Brillouin-zónája.

a) Szoros kötésű közelítésben

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t_1 \left(\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2)\right) + 2t_2 \left(\cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)) + \cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))\right) =$$

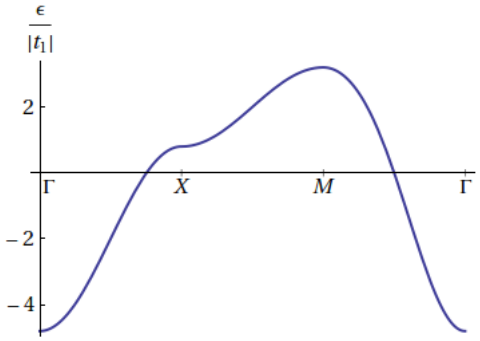
$$= -2|t_1| \left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right) - 4|t_2| \cos(k_x a) \cos(k_y a)$$

b) A $\Gamma - X$ vonalon $k_y = 0$ és $k_x a \in [0; \pi]$, így

$$\varepsilon_{\Gamma - X} = -2|t_1| \left(\cos(k_x a) + 1\right) - 4|t_2| \cos(k_x a)\,.$$

Az $X - M$ vonalon $k_x = \pi/a$ és $k_y a \in [0; \pi]$, így

$$\varepsilon_{X - M} = -2|t_1| \left(-1 + \cos(k_y a)\right) + 4|t_2| \cos(k_y a)\,.$$



10.10. ábra. A spektrum a nevezetes vonalakon. Az ábrázolásnál $|t_2|/|t_1| = 0,2$ arányt tekintettünk.

Az $M - \Gamma$ vonalon $k_x = k_y \in [0; \pi]$, így

$$\varepsilon_{M-\Gamma} = -4|t_1| \cos(k_x a) - 4|t_2| \cos^2(k_x a)\,.$$

c) Kis betöltések esetén a sáv aljánál találhatunk elektronokat. A 10.10. ábrán is látható, hogy a sáv alja a $\mathbf{k} = 0$ hullámszám környékén van. A $\mathbf{k} = 0$ pont kis környezetében a spektrum izotróp.

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx -4(|t_1| + |t_2|) + (|t_1| + 2|t_2|)k^2 a^2$$

Emiatt az effektív tömeg tenzor az egységmátrix skalárszorosa lesz és

$$m^*_\Gamma = \frac{\hbar^2}{2(|t_1| + 2|t_2|)a^2}.$$

d) Majdnem teljesen töltött sáv esetén ($n \to 2$) a kvázirészecskék az $M(\pi/a; \pi/a)$ körüli lyukak (lsd. 10.10 ábra), amennyiben $|t_1| > 2|t_2|$. A spektrum itt

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx 4(|t_1| - |t_2|) - (|t_1| - 2|t_2|)\Delta k^2 a^2$$

alakban írható, ahol $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - M$. Az effektív tömeg

$$m^*_M = -\frac{\hbar^2}{2(|t_1| + 2|t_2|)a^2}$$

negatív értéket vesz fel. Ha negatív az effektív tömeg, akkor lyukakról beszélünk.

A vezetőképesség kiszámításához a

$$\sigma = e^2\tau \frac{1}{2\pi^2} \int \mathrm{d}^2 k \delta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{k}))\mathbf{v}(\mathbf{k}) \circ \mathbf{v}(\mathbf{k})$$

integrált kell kiértékelni, ahol

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar}{m^*_M}\Delta\mathbf{k}$$

a kvázirészecske sebesség és a τ relaxációs idő a feladat feltevése szerint nem függ a hullámszámtól. Majdnem teljesen töltött sáv esetén a Fermi-energia egy az M pont körüli, Δk_F sugarú kör lesz. A Fermi-hullámszámot az $\varepsilon(\Delta k_F) = \varepsilon_F$ egyenlet határozza meg.

$$\sigma = e^2\tau\frac{1}{2\pi^2}\int_0 \mathrm{d}\Delta k \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, \Delta k \delta(\varepsilon_F - \varepsilon(\Delta k))\frac{\hbar^2}{m_M^{*2}} \begin{pmatrix} \Delta k^2\cos^2\varphi & \Delta k^2\cos\varphi\sin\varphi \\ \Delta k^2\cos\varphi\sin\varphi & \Delta k^2\sin^2\varphi \end{pmatrix} =$$

$$= e^2\tau\frac{1}{2\pi^2}\frac{\hbar^2}{m_M^{*2}}\int_0 \mathrm{d}\varepsilon\frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{2m_M^*}{\varepsilon}}\left(\frac{2m_M^*\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2}\delta(\varepsilon_F - \varepsilon_0 - \varepsilon)\begin{pmatrix} \pi & 0 \\ 0 & \pi \end{pmatrix} =$$

$$= e^2\tau\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_F}{\pi\hbar^2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

ahol bevezettük az $\varepsilon_0 = 4(|t_1| - |t_2|)$ jelölést. Vegyük észre, hogy a kapott eredmény megfelel a Neumann-elvnek. A rendszer négyfogású forgatási szimmetriája miatt a tenzormennyiségek csak az egységmátrix többszörösei lesznek.

10.3.3. Tetragonális rács

Tekintsünk egy anizotróp, egyatomos elemi cellájú tetragonális rácsot. A rácsállandó x és y irányban a, z irányban c, az elsőszomszéd átfedési integrálok legyenek t_a és t_c ($t_a < t_c < 0$).

a) Írd fel a diszperziós relációt szoros kötés közelítésben.

b) Határozd meg az effektív tömeg tenzort a sáv alján.

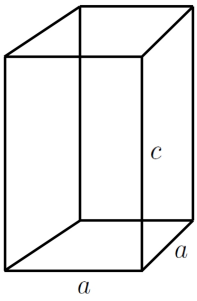
c) Különböző betöltések esetén ábrázold Fermi-felületet a Brillouin-zóna $k_y = 0$ és $k_z = 0$ síkmetszetein.

d) Milyen betöltési szám tartományban közelíthető a rendszer egy kvázikétdimenziós szabad elektrongázzal, mely Fermi-felületének egyenlete:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_a}(k_x^2 + k_y^2),\ k_z \in \left[-\frac{\pi}{c}, \frac{\pi}{c}\right]?$$

Megoldás:
a) Csak elsőszomszéd átfedési integrálokat veszünk figyelembe, így az energiadiszperzió:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 + \sum_\delta e^{i\mathbf{k}\delta}t_\delta = \varepsilon_0 + 2t_a\left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right) + 2t_c\cos(k_z c),$$



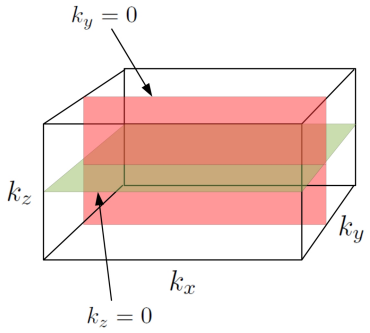
10.11. ábra. Tetragonális rács.

ahol δ az elsőszomszéd rácspontok helyvektorait jelenti.

b) Az effektív tömeg tenzor a sáv alján:

$$\mathbf{m}_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{k}} \bigg|_{\mathbf{k}=0} \right)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2a^2|t_a|} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2a^2|t_a|} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2c^2|t_c|} \end{pmatrix}$$

c) A Brillouin-zóna a $k_y = 0$ és $k_z = 0$ síkmetszetekkel a 10.12. ábrán látható.



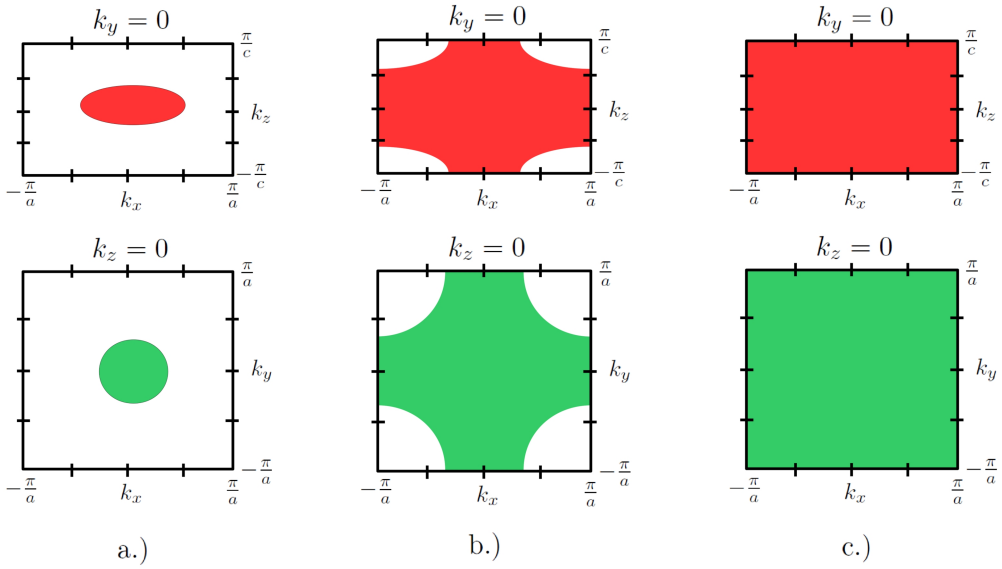
10.12. ábra. A Brillouin-zóna.

Kis betöltések esetén a sáv alján ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$ körül) a diszperzió négyzetes:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \simeq \frac{\hbar^2}{2m_a}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_c} k_z^2,$$

ezért a $k_z = 0$ síkban a Fermi-felület kör alakú, a $k_y = 0$ síkban ellipszis.
Ha a sáv félig töltött, a Brillouin-zóna élei körüli állapotok nincsenek betöltve, és a

Fermi-felület bonyolultabb alakú. Tekintsük ezért előbb az $a = c$, $t_a = t_c$ esetet. Ekkor a Fermi-felület alakját a $\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) = 0$ egyenlet adja meg. Ezért a $k_y = 0$ síkban a $(k_x, k_z) = \left(\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{2a}\right)$, illetve a $(k_x, k_z) = \left(\pm\frac{\pi}{2a}, \pm\frac{\pi}{a}\right)$ pontok adják meg a Brillouin-zóna határa és a Fermi-felület metszéspontját. $|t_a| > |t_c|$ esetén ezek a pontok eltolódnak, és a Fermi-felület metszetei közelítőleg a 10.13. ábra b) részén látható alakúak lesznek.
Nagy betöltéseknél, amennyiben $\varepsilon_F > \varepsilon_0 + 2|t_a|$, a $k_y = 0$ és $k_z = 0$ síkok minden állapota be van töltve (lásd a 10.13. ábra c) részét).



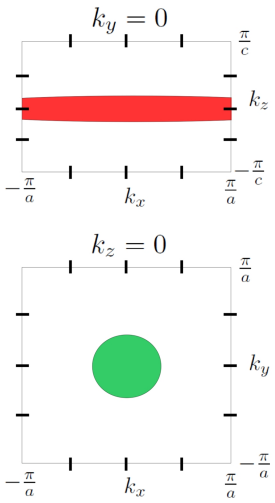
10.13. ábra. A Fermi-felület a $k_y = 0$ és $k_z = 0$ síkban. a) alacsony betöltés, b) félig töltött sáv, c) nagy betöltés.

d) Amennyiben $|t_c| \ll |t_a|$,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \simeq \varepsilon_0 + 2t_a \left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right),$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \simeq \varepsilon_0 - 2|t_a| + \frac{\hbar^2}{2m_a}(k_x^2 + k_y^2), \; k_z \in \left[-\frac{\pi}{c}, \frac{\pi}{c}\right],$$

így alacsony betöltés esetén rendszer kétdimenziós elektrongáznak tekinthető. A Fermi-felület síkmetszetei ebben az esetben a 10.14. ábrán láthatók.



10.14. ábra. A Fermi-felület $|t_c| \ll |t_a|$ esetén.

10.4. Házi feladatok

17. házi feladat

Tekintsünk egy egydimenziós rácsot szoros kötésű közelítésben. Az atomok potenciálját közelítsük Dirac-delta potenciállal.

a) Határozzuk meg az atomi hullámfüggvény alakját!

b) Határozzuk meg az elektronok diszperziós relációját!

18. házi feladat

Egy s atomi pályákból felépülő háromdimenziós lapcentrált köbös rácson az elsőszomszédok közötti átfedési integrál t_1, a második legközelebbi atomok közötti pedig t_2. A Bravais-cella éle legyen a.

a) Adj meg egy lehetséges elemi bázisvektorrendszert! Add meg a elektron sávszerkezetet tight-binding - azaz szoros-kötésű - közelítésben másodszomszédig bezárólag!

b) Határozd meg az elemi reciprokrácsvektorokat! Milyen rácsot definiálnak? Add meg a Brillouin-zóna nevezetes $\Gamma(0,0,0)$, $Z(0,0,2\pi/a)$, $M(0,\pi/a,2\pi/a)$

pontjaiban az elektronenergiákat, majd ábrázold vázlatosan a diszperziót a megadott pontok mentén! Mekkora a sávszélesség?

11. fejezet

Elektronok állapotsűrűsége

11.1. Hullámszámtérbeli állapotsűrűség

Egy egydimenziós, L hosszúságú mintában periodikus határfeltétel szerint

$$\Psi_k(x) = \Psi_k(x+L) = e^{ikL}\Psi_k(x) \tag{11.1}$$

$$e^{ikL} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad k = \frac{2\pi}{L}n \qquad n \in \mathbb{Z}$$

Ezek alapján egy dimenzióban az állapotsűrűség a hullámszámtérben

$$N(k) = \frac{L}{2\pi}\,,$$

vagyis független a hullámszámtól. Több dimenzióban

$$N(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^d},$$

ahol V a minta térfogata. Emlékezhetünk, hogy a fononok hullámszám térbeli állapotsűrűségét is ugyanígy írhattuk fel.

11.2. Állapotszám és energiafüggő állaptsűrűség

Adott diszperziós relációjú rendszerben az állapotszámot

$$\Omega(\varepsilon) = 2\sum_{\mathbf{k}} \Theta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

szerint definiálhatjuk. A 2-es faktor a spin degenerációból fakad. Termodinamikai limeszben az összegzésről áttérhetünk integrálásra. Ekkor

$$\Omega(\varepsilon) = 2\frac{V}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d k \Theta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})).$$

Az állapotsűrűség definíció szerint

$$G(\varepsilon) = \frac{d\Omega}{d\varepsilon} = 2\frac{V}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d k \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))\,.$$

Az ε és $\varepsilon + d\varepsilon$ energiák közti energiájú egyrészecske-állapotok száma a rendszerben $G(\varepsilon)d\varepsilon$. Az itt definiált állapotsűrűség extenzív mennyiség. Szokás térfogategységre normált alakját is használni.

$$g(\varepsilon) = \frac{G(\varepsilon)}{V} = 2\frac{1}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d k \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

Ha a diszperziós reláció izotróp, akkor másképpen is kiszámolhatjuk az állapotsűrűséget.

$$G(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = 2N(\mathbf{k})\mathrm{d}^d k$$

$$\text{1 dimenzióban:} \qquad G(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = 2\frac{L}{2\pi}2\mathrm{d}k \qquad \Rightarrow \qquad G(\varepsilon) = \frac{2L}{\pi}\left(\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}k}\right)^{-1}$$

$$\text{2 dimenzióban:} \qquad G(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = 2\frac{A}{(2\pi)^2}2\pi k\mathrm{d}k \qquad \Rightarrow \qquad G(\varepsilon) = \frac{A}{\pi}k(\varepsilon)\left(\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}k}\right)^{-1}$$

$$\text{3 dimenzióban:} \qquad G(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = 2\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi k^2\mathrm{d}k \qquad \Rightarrow \qquad G(\varepsilon) = \frac{V}{\pi^2}k^2(\varepsilon)\left(\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}k}\right)^{-1}$$

11.2.1. Szabad elektrongáz

Szabad elektrongáz

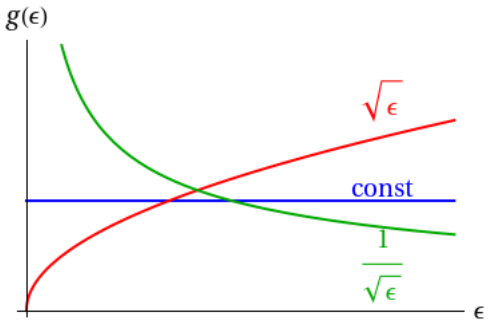
$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}k} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

spektruma alapján

$$\text{1 dimenzióban:} \qquad G(\varepsilon) = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}} \propto \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$$

$$\text{2 dimenzióban:} \qquad G(\varepsilon) = \frac{Am}{\pi\hbar^2}$$

$$\text{3 dimenzióban:} \qquad G(\varepsilon) = \frac{V}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m^3\varepsilon} \propto \sqrt{\varepsilon}$$



11.1. ábra. Szabad elektronok állapotsűrűsége egy-, két- és három dimenzióban.

11.2.2. Kétdimenziós négyzetrács

Kétdimenziós négyzetrács esetén szoros kötésű közelítésben a diszperziós reláció

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + 2t\cos k_x a + 2t\cos k_y a \qquad\qquad t < 0$$

alakban írható. Kis betöltések esetén csak az alacsony energiájú, vagyis a $\mathbf{k} = 0$-hoz közeli hullámszámú állapotokat vesszük figyelembe. Ebben a tartományban a spektrum közelíthető

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_0 + 2t\left(1 - \frac{(k_x a)^2}{2}\right) + 2t\left(1 - \frac{(k_y a)^2}{2}\right) = \varepsilon_0 - 4|t| + |t|a^2k^2$$

szerint. A kétdimenziós, izotróp rendszerre vonatkozó formula szerint az állapotsűrűség

$$G(\varepsilon) = \frac{A}{2|t|a^2\pi} \propto \text{const.}$$

A szabad elektrongázhoz hasonlóan itt is konstans az energia függvényében (ez azon múlik, hogy kis betöltésekre a diszperziós relációt közelíthettük egy parabolikus spektrummal).

11.3. Fermi-tenger alapállapot

Zérus hőmérsékleten az elektronok a legalsó energiájú állapotokat egyesével töltik be a Pauli-elv alapján. Az állapotok az ε_F Fermi-energiáig töltődnek.

$$N = \int_{-\infty}^{\varepsilon_\mathrm{F}} G(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon$$

A három dimenziós szabad elektron gáz esetén kapott állapotsűrűség formulát felhasználva

$$N = \frac{V}{\pi^2\hbar^3}\int_0^{\varepsilon_\mathrm{F}} \sqrt{2m^3\varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon = \frac{V}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m^3}\frac{2}{3}\varepsilon_\mathrm{F}^{\frac{3}{2}}$$

a teljes részecskeszám. Az $n = N/V$ részecskesűrűséggel így

$$n = \frac{\sqrt{8m^3}}{3\pi^2\hbar^3}\varepsilon_{\mathrm{F}}^{\frac{3}{2}}$$

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = \frac{(3\pi^2\hbar^3 n)^{\frac{2}{3}}}{2m}$$

adódik. A Fermi-hullámszám pedig

$$k_{\mathrm{F}} = \sqrt{\frac{2m\varepsilon_{\mathrm{F}}}{\hbar^2}} = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3} .$$

Az alapállapoti energia általános esetben

$$U(T=0) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \varepsilon G(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon$$

szerint számolható ki. Három dimenziós szabad elektron gáz esetén ez

$$U(T=0) = \frac{Vm}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m}\int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \varepsilon^{3/2}\,\mathrm{d}\varepsilon = \frac{Vm}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m}\frac{2}{5}\varepsilon_{\mathrm{F}}^{5/2},$$

az egy részecskére jutó energia pedig

$$\frac{U(T=0)}{N} = \frac{3}{5}\varepsilon_{\mathrm{F}}.$$

11.4. Bethe-Sommerfeld-sorfejtés

Fermionokat tartalmazó rendszerekben az egyrészecske-állapotokban megtalálható részecskék számának várható értéke

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}. \qquad \text{Fermi-Dirac eloszlás} \qquad \beta = \frac{1}{kT} \qquad \lim_{T\to 0}\mu(T) = \varepsilon_{\mathrm{F}}$$

Tetszőleges energia függő $H(\varepsilon)$ függvény esetén alacsony hőmérsékleten teljesül a

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(\varepsilon)f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \approx \int_{-\infty}^{\mu} H(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 H'(\mu)$$

közelítés. Ha $H(\varepsilon)$ az állapotsűrűség, akkor a fenti integrál éppen a teljes részecskeszámot adja meg.

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon)f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \approx \int_{-\infty}^{\mu} G(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 G'(\mu) \approx$$

$$\approx \underbrace{\int_{-\infty}^{\varepsilon_\mathrm{F}} G(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon}_{N} + (\mu-\varepsilon_\mathrm{F})G(\varepsilon_\mathrm{F}) + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 G'(\varepsilon_\mathrm{F})$$

$$\mu = \varepsilon_\mathrm{F} - \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 \frac{G'(\varepsilon_\mathrm{F})}{G(\varepsilon_\mathrm{F})}$$

Megkaptuk a kémiai potenciál hőmérséklet függését alacsony hőmérsékleteken. Ha $H(\varepsilon)$ helyébe $\varepsilon G(\varepsilon)$-t helyettesítünk, akkor a fenti integrál a rendszer teljes energiája lesz.

$$U(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon G(\varepsilon) f(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \approx \int_{-\infty}^{\mu} \varepsilon G(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\left(\mu G'(\mu) + G(\mu)\right) \approx$$

$$\approx \underbrace{\int_{-\infty}^{\varepsilon_\mathrm{F}} \varepsilon G(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon}_{U(T=0)} + (\mu-\varepsilon_\mathrm{F})\varepsilon_\mathrm{F} G(\varepsilon_\mathrm{F}) + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\left(\varepsilon_\mathrm{F} G'(\varepsilon_\mathrm{F}) + G(\varepsilon_\mathrm{F})\right)$$

A kémiai potenciál korábban kapott kifejezését behelyettesítve

$$U(T) = U(T=0) + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 G(\varepsilon_\mathrm{F})$$

adódik. Az alacsonyhőmérsékleti fajhő

$$C(T) = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\pi^2}{3} k^2 T G(\varepsilon_\mathrm{F}) = \gamma T$$

szerint számítható, ahol γ a fajhőegyüttható. Az elektronfajhő tehát $\propto T$ szerint viselkedik alacsony hőmérésekleten, ellentétben a fonon fajhővel, amely $\propto T^3$ szerint indul.

11.5. Példa feladatok elektronok állapotsűrűségének számolására

11.5.1. Kétdimenziós háromszög rács

Tekintsünk egy kétdimenziós háromszög rácsot s atomi pályákkal, melyek energiája a szeparált atomi határesetben ε_0 lenne és $t < 0$ az elsőszomszéd átfedési integrál.

a) Határozzuk meg az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítésben!

b) Számítsuk ki az effektív tömeg tenzort a sáv aljánál!

c) Számoljuk ki az állapotsűrűséget a sáv aljánál! Hogyan viszonyul ez az állapotsűrűség a sávszélességhez?

Megoldás:
a) A háromszög rácsban az elemi rácsvektorok

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

alakban adhatók meg. Az elsőszomszédokhoz mutató vektorok $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $-\mathbf{a}_1$, $-\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$ és $-\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$. A diszperziós reláció ezek alapján

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2|t| \left[\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))\right].$$

b) A sáv alja $\mathbf{k} = 0$-nál van. Itt a spektrumot sorba fejtve

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_0 - 6|t| + \frac{3|t|a^2}{2} k^2.$$

Ez alapján az effektív tömeg tenzor az egységmátrixszal lesz arányos.

$$m_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{3|t|a^2}$$

c) Az energiafüggő állapotsűrűség számolásához az izotróp spektrumra vonatkozó módszert alkalmazzuk. Két dimenzióban:

$$2\frac{A}{(2\pi)^2} 2\pi k \mathrm{d}k = G(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$$

$$G(\varepsilon) = \frac{A}{3\pi|t|a^2} = \frac{N}{\sqrt{3}\pi|t|}$$

A képletekben A a minta területe és N az elemi cellák száma. A sávszélesség arányos az átfedési integrállal, jelen esetben $W = 12|t|$, így

$$G(\varepsilon) \propto \frac{1}{W}$$

11.5.2. Tércentrált köbös rács

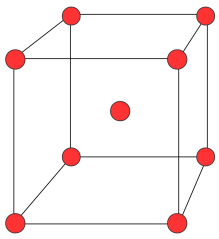
A nátrium (Na) egy vegyértékelektronnal rendelkezik, és tércentrált köbös rácsban kristályosodik. A köbös Bravais-cella oldaléle $a = 0,42\,\text{nm}$. A kísérletileg meghatározott fajhő együttható értéke $\gamma = 1,46\,\frac{\text{mJ}}{\text{mol}\cdot\text{K}^2}$.

a) Mekkora az elektronsűrűség a kristályban?

b) Számold ki a Fermi-hullámszám értékét szabad elektron közelítésben!

c) Add meg az állapotsűrűséget szabad elektron közelítésben.

d) Mekkora a vegyérték-elektronok effektív tömege szabad elektron egységekben?



11.2. ábra. Tércentrált köbös rács.

Megoldás:

a) A tércentrált köbös rács elemi cellánként egy atomot, és így egy vegyérték-elektront tartalmaz, ezért a vegyértékelektronok sűrűsége:

$$n = \frac{2}{a^3} = 2,7 \cdot 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3} = 0,045\,\mathrm{mol/cm}^3,$$

ahol kihasználtuk, hogy az elemi cella térfogata $a^3/2$.

b) Szabad elektron közelítésben $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_F^2}{2m_{\mathrm{eff}}}$, így

$$n = \frac{2}{V} \sum_{|\mathbf{k}|<k_F} 1 = 2 \int_{|\mathbf{k}|<k_F} \frac{\mathrm{d}^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} = 9,28\,\frac{1}{\mathrm{nm}}, \quad \text{így} \quad \lambda_F = \sqrt[3]{\frac{4\pi}{3}}\,a = 0,68\,\mathrm{nm}.$$

c) Az állapotsűrűség a Fermi-energiánál, beleszámolva mindkét spinállapotot,

$$g(\varepsilon_F) = \frac{k^2}{\pi^2} \left(\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}k} \right) \Bigg|^{-1}_{\varepsilon=\varepsilon_F} = \frac{m_{\mathrm{eff}}}{\hbar^2\pi^2} k_F = \frac{m_{\mathrm{eff}}}{\hbar^2\pi^2} \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a}.$$

d) Az energiasűrűség a Sommerfeld-sorfejtés szerint $\frac{E(T)}{V} = \frac{E(T=0)}{V} + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 g(\varepsilon_F)$, így a $C = \frac{1}{V}\frac{\partial E}{\partial T} = n\gamma T$ képlettel definiált fajhőegyüttható

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3}\frac{k_{\mathrm{B}}^2}{n} g(\varepsilon_F) = \frac{\pi^2}{3} k_{\mathrm{B}}^2 \frac{a^3}{2} \frac{m_{\mathrm{eff}}}{\hbar^2\pi^2} \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{a} = \frac{\sqrt[3]{6\pi^2}}{6} \frac{k_{\mathrm{B}}^2 a^2}{\hbar^2} m_{\mathrm{eff}},$$

amelyből kapjuk, hogy

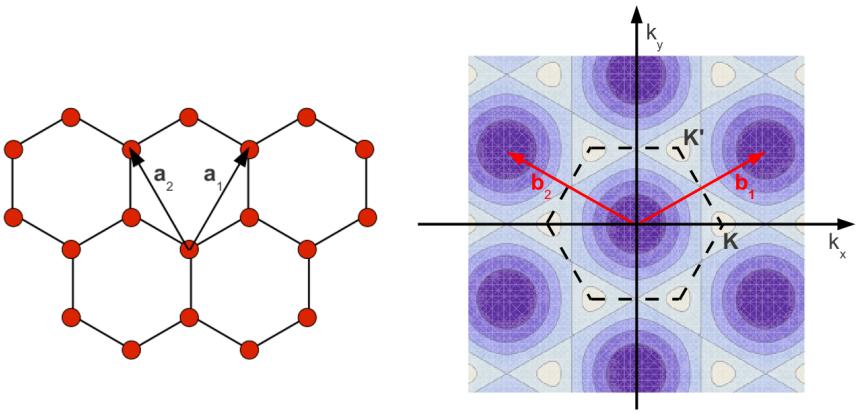
$$m_{\text{eff}} \simeq 2,59 \cdot 10^{-31}\,\text{kg} \simeq 0,28\, m_{\text{e}}.$$

11.5.3. Grafén fajhője

Tekintsük a grafén energiaspektrumát szoros kötésű közelítésben.

a) A grafénben a Fermi-energia egzaktul 0 energiánál van, itt a két sáv az ún. Dirac-pontokban érintkezik. Ezekben a pontokban az elektronok diszperziós relációja lineáris, a tömeg nélküli Dirac-fermionokéhoz hasonlóan. Mi az elektronok állapotsűrűsége, és mi az alacsony hőmérsékleti fajhő hőmérsékletfüggése?

b) Tegyük fel, hogy az ε_F Fermi-energiát eltoljuk, például úgy hogy a grafénmintára külső potenciált kapcsolunk. Legyen $|\varepsilon_F| \ll |t|$, így a spektrum továbbra is lineárisnak tekinthető. Hogyan viselkedik ekkor az alacsony hőmérsékleti fajhő?



11.3. ábra. Bal oldal: grafénrács az elemi rácsvektorokkal. Jobb oldal: a grafén elemi reciprokrácsvektorai és Brillouin-zónája – a színkód az alsó sáv energiáját jelöli. A két Dirac-pontot $\mathbf{K}$ és $\mathbf{K}'$ hullámszámnál találjuk.

Megoldás:

a) A 10.2.1. példában csak a t elsőszomszéd átfedési integrálokat vettünk figyelembe, az elemi rácsvektorok pedig a következők voltak:

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}. \tag{11.2}$$

Ekkor az alsó és felső sáv egyenlete

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm|t| \sqrt{3 + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + 2\cos\left(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)\right)}. \tag{11.3}$$

Ezek kizárólag a hat Dirac-pontban érintkeznek a Brillouin-zóna sarkainál. A Dirac pontok közül azonban csak kettő független,

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad \text{és} \qquad \mathbf{K}' = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\begin{pmatrix}1/2\\\sqrt{3}/2\end{pmatrix}, \tag{11.4}$$

a többi ezeknek reciprokrácsvektor szerinti eltoltja (11.3. ábra). Ezen pontok körül a spektrum jó közelítéssel lineáris

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{K}+\delta\mathbf{k}) \approx \pm\frac{\sqrt{3}}{2}\,|t|\,a|\delta\mathbf{k}|. \tag{11.5}$$

Ebből könnyen kiszámolhatjuk az elektronok állapotsűrűségét, amelyet az állapotszám deriváltjaként kaphatunk. Figyelembe véve a spindegenerációt és azt, hogy két Dirac-pontunk van, az állapotszám a vezetési (+ indexű) sávban

$$\Omega_+(\varepsilon) = 2A\int\frac{\mathrm{d}^2k}{(2\pi)^2}\,\Theta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}}<\varepsilon\right) \approx 4A\int\frac{\mathrm{d}^2\delta k}{(2\pi)^2}\,\Theta\left(\frac{\sqrt{3}}{2}|t|a|\delta\mathbf{k}|<\varepsilon\right) = \frac{4A}{3\pi}\frac{\varepsilon^2}{|t|^2a^2}\,. \tag{11.6}$$

A képletben A a grafén minta területe. A vezetési sáv állapotsűrűsége ez alapján

$$g_+(\varepsilon) = \frac{1}{A}\frac{\partial\Omega(\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = \frac{8}{3\pi}\frac{\varepsilon}{|t|^2a^2}$$

lineáris függvénye az energiának ellentétben a közel szabad elektronokra kapott konstans értékkel. A vegyérték ($-$ indexű) sáv esetén is elvégezve a számolást megadhatjuk a negatív energiákra is érvényes

$$g(\varepsilon) = \frac{8}{3\pi}\frac{|\varepsilon|}{|t|^2a^2} \propto \frac{|\varepsilon|}{|t|^2} \tag{11.7}$$

formulát.

A rendszer fajhőjének meghatározásához számoljuk ki az összenergiáját $k_BT \ll |t|$ hőmérsékleten. Feles betöltés esetén a Fermi-energia véges hőmérsékleten is 0 energiánál marad, mivel a spektrum $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$ elektron-lyuk transzformációra szimmetrikus. Így az energia egyszerűen kiszámolható a Fermi-eloszlásfüggvény segítségével,

$$E = \int\mathrm{d}\varepsilon\,Ag(\varepsilon)\,\frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_\mathrm{B}T}+1} = \frac{8A}{3\pi}\frac{(k_\mathrm{B}T)^3}{|t|^2a^2}\int\mathrm{d}x\,|x|\,\frac{x}{e^x+1} \propto \frac{T^3}{|t|^2}, \tag{11.8}$$

ahol bevezettük az $x = \varepsilon/k_\mathrm{B}T$ változót, hogy kiemelhessük az integrál hőmérsékletfüggését. Ebből látható, hogy a fajhő kvadratikus alacsony hőmérsékleten

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} \propto \frac{T^2}{|t|^2}. \tag{11.9}$$

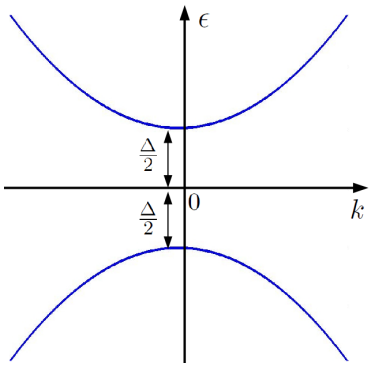
b) Abban az esetben, mikor a Fermi-energia nem a Dirac-pontoknál helyezkedik el valamint alacsony hőmérsékleten, mikor $k_{\mathrm{B}}T \ll \varepsilon_F \ll |t|$, alkalmazhatjuk az elméleti bevezetőben kapott eredményt.

Így az alacsony hőmérsékleti fajhő a $T \ll \varepsilon_F \ll |t|$ tartományban lineáris T-ben,

$$C \propto \frac{\varepsilon_F T}{|t|^2}. \tag{11.10}$$

11.5.4. Félvezetők állapotsűrűsége

Tekintsük egy szennyezetlen félvezető egyszerű modelljét, amelyben a tiltott sáv szélessége Δ, és a vezetési sáv alján és a valencia sáv tetején az elektronok egyforma m effektív tömeggel rendelkeznek, ld. a 11.4. ábrát. Számoljuk ki az elektronfajhő hőmérsékletfüggését alacsony hőmérsékleten.



11.4. ábra. A félvezető spektruma az egyszerűsített modellben.

Megoldás:

Zérus hőmérsékleten a félvezető valenciasávja teljesen betöltött, a vezetési sáv teljesen üres. Alacsony hőmérsékleten a termikus gerjesztések miatt viszont elektronok jelennek meg a vezetési sávban, és a valenciasávból felgerjesztett elektronok helyén pedig lyukak maradnak. Mivel a két sávban azonos az effektív tömeg, és a felgerjesztett elektronok és a lyukak száma azonos, a Fermi-energia végig a sáv közepén marad, 0 energiánál.

A félvezető elektronoktól származó energiája a zérus hőmérsékletű esethez képest

$$\Delta E = \int_{\Delta/2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{\varepsilon \, g_{\mathrm{c}}(\varepsilon)}{e^{\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T}+1} + \int_{-\infty}^{\Delta/2} \mathrm{d}\varepsilon \, \varepsilon \, g_{\mathrm{v}}(\varepsilon) \left(\frac{1}{e^{\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T}+1} - 1 \right), \tag{11.11}$$

ahol $g_c(\varepsilon)$ és $g_v(\varepsilon)$ az elektronok térfogategységre normált állapotsűrűsége a vezetési és a valenciasávban, a spindegenerációt is figyelembe véve:

$$g_c(\varepsilon) = g_v(-\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon - \Delta/2}. \tag{11.12}$$

ΔE képletében az elektrongerjesztések (első tag) és lyukgerjesztések járuléka (második tag) egyenlő a spektrum $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$ elektron-lyuk szimmetriája miatt, így

$$\Delta E = 2\int_{\Delta/2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, \frac{\varepsilon\, g_c(\varepsilon)}{e^{\varepsilon/k_B T}+1} \approx 2\int_{\Delta/2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon\, g_c(\varepsilon)\, e^{-\varepsilon/k_B T} \tag{11.13}$$

$$= \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_{\Delta/2}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon\, \sqrt{\varepsilon - \Delta/2}\, e^{-\varepsilon/k_B T}. \tag{11.14}$$

Bevezetve az $x = (\varepsilon - \Delta/2)/k_B T$ változót kiemelhetjük ΔE hőmérsékletfüggő tagjait

$$\Delta E \propto e^{-\Delta/2k_B T}(k_B T)^{3/2}\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, \sqrt{x}\,(\Delta/2 + k_B T x)\; e^{-x} \tag{11.15}$$

$$= e^{-\Delta/2k_B T}\left((k_B T)^{3/2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{\Delta}{2} + (k_B T)^{5/2}\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right). \tag{11.16}$$

Alacsony hőmérsékleten a zárójelben lévő első tag adja a vezető rendet. Az alacsony hőmérsékleti elektronfajhő innen már egyszerűen kiszámolható. Ennek T-ben vezető rendje

$$C = \frac{\partial \Delta E}{\partial T} \propto \frac{e^{-\Delta/2k_B T}}{\sqrt{T}}. \tag{11.17}$$

11.5.5. Vezetőképesség fémekben

Egy kétdimenziós vezetőben (tehát például egy néhány tízezer atomnyi vastagságú, szigetelő felületére felvitt fémes rétegben) a vezetési elektronok diszperziós relációja legyen $\varepsilon(\mathbf{k}) = \gamma|\mathbf{k}| + \varepsilon_0$.

a) Határozd meg e két dimenziós vezető egyenáramú vezetőképesség-tenzorát relaxációs idő közelítésben, feltételezve, hogy a τ relaxációs idő független az elektronok hullámszámától. (Vedd a $k_B T \ll \varepsilon_F$ határesetet, amely fémekre szobahőmérsékleten is jó közelítéssel igaz.)

b) Add meg a frekvenciafüggő vezetőképesség tenzort a fenti határesetben.

c) A frekvenciafüggő vezetőképességre vonatkozó összegszabály segítségével fejezd ki γ-t ε_F és ε_0 segítségével.

Útmutatás: Fémek egyenáramú vezetőképesség tenzorát relaxációs idő közelítésben a következő egyenlettel lehet kifejezni (Irodalom: Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai II. 24.3.4. fejezet)

$$\sigma_{\mathrm{DC}} = e^2\tau\, 2 \int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d} \left(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \circ \mathbf{v}(\mathbf{k})\right) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right),$$

ahol, e az elemi töltés, d a dimenziószám, f a Fermi-függvény, $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}}$ az elektronok csoportsebessége, a τ relaxációs idő pedig azzal kapcsolatos, hogy átlagosan milyen gyakran szóródnak az elektronok a fémben. A $k_{\mathrm{B}}T \ll \varepsilon_F$ határesetben

$$-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \approx \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F).$$

Ha a fémre egy ω körfrekvenciájú váltófeszültséget vagy váltóáramot kapcsolunk, a vezetőképességét a σ_{AC} frekvenciafüggő vezetőképesség tenzor határozza meg. Ez (ugyanúgy, ahogy a Drude-modellnél) a következő egyszerű kifejezéssel kapható meg az egyenáramú vezetőképesség tenzorból:

$$\sigma_{\mathrm{AC}} = \frac{\sigma_{\mathrm{DC}}}{1 - i\omega\tau}.$$

A váltóáramú vezetőképességre vonatkozó összegszabály

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Re}\, \sigma_{\mathrm{AC}}(\omega) = \frac{\pi}{2} e^2 \int \frac{\mathrm{d}^2 k}{2\pi^2}\, f(\varepsilon(\mathbf{k}))\, \mathbf{m}_{\mathrm{eff}}^{-1}(\mathbf{k}),$$

amely anizotróp rendszerek esetén is érvényes. (Irodalom: Landau, Lifshitz: Elméleti fizika, 8. kötet, 282. oldal) Az összegszabály hasznos ellenőrzési lehetőséget biztosít a vezetőképesség számolások végeredményére vonatkozóan.

Megoldás:

a) Az elektronok csoportsebessége

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial(\varepsilon_0 + \alpha|\mathbf{k}|)}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\alpha}{\hbar}\mathbf{e}_{\mathbf{k}},$$

ahol $\mathbf{e}_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ a $\mathbf{k}$ hullámszám irányába mutató egységvektor. A Fermi-energiára koncentrált Dirac-delta átalakítható

$$\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F) = \frac{1}{\alpha}\delta\left(|\mathbf{k}| - \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\alpha}\right)$$

alakban. Ha ugyanis $g(x)$ egy a $g(x_1) = g(x_2) = \cdots = g(x_n) = 0$ nullhelyeinek egy környezetében folytonosan differenciálható függvény, akkor $\delta(g(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{|g'(x_i)|}\delta(x - x_i)$. Így az egyenáramú vezetőképesség tenzor

$$\sigma_{\mathrm{DC}} = \frac{e^2}{2\pi^2}\,\tau\,\frac{\alpha}{\hbar^2} \int \mathrm{d}^2 k\, \left(\mathbf{e}(\mathbf{k}) \circ \mathbf{e}(\mathbf{k})\right) \delta\left(|\mathbf{k}| - \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\alpha}\right).$$

Áttérve polárkoordinátákra, az $\mathbf{e_k} = (\cos\varphi, \sin\varphi)^T$ helyettesítéssel

$$\sigma_{\mathrm{DC}} = \frac{e^2}{2\pi^2}\,\tau\,\frac{\alpha}{\hbar^2}\int \mathrm{d}k\,k\,\delta\left(k - \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\alpha}\right)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\begin{pmatrix}\cos^2\varphi & \cos\varphi\cdot\sin\varphi\\ \cos\varphi\cdot\sin\varphi & \sin^2\varphi\end{pmatrix}$$
$$= \frac{e^2}{h}\,\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\hbar/\tau}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

A képlet természetesen csak $\varepsilon_F \geq \varepsilon_0$ esetén érvényes. $\varepsilon_F \leq \varepsilon_0$ esetén kiürül a vezetési sáv, és a vezetőképesség 0 lenne. Az e^2/h mennyiség vezetőképesség dimenziójú természeti állandó, amelyet vezetőképesség kvantumnak neveznek. A fenti szorzat második tagja dimenziótlan, tehát helyes dimenziójú mennyiséget kaptunk. Megjegyezzük, hogy az eredmény összhangban van a Neumann-elvvel: négyfogású szimmetriájú kristály vezetőképesség tenzora diagonális kell hogy legyen.

b) A frekvenciafüggő vezetőképesség tenzort egyszerűen megkaphatjuk az előbbi eredményből:

$$\sigma_{\mathrm{AC}} = \frac{e^2}{h}\,\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\hbar/\tau}\,\frac{1}{1 - i\omega\tau}.$$

c) Mivel $\mathrm{Re}\,\sigma_{\mathrm{AC}}(\omega) = \frac{\sigma_{\mathrm{DC}}}{1+\omega^2\tau^2}$, a σ_{AC}-re vonatkozó összegszabály bal oldalára a következőt kapjuk:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\,\mathrm{Re}\,\sigma_{\mathrm{AC}}(\omega) = \frac{\sigma_{\mathrm{DC}}}{\tau}\,\frac{\pi}{2} = \frac{e^2}{h}\,\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\hbar}\,\frac{\pi}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{11.18}$$

Az effektív tömeg tenzor

$$\mathbf{m}_{\mathrm{eff}}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\,\frac{\partial^2\varepsilon(\mathbf{k})}{\partial\mathbf{k}\,\partial\mathbf{k}} = \frac{\gamma}{\hbar^2}\,\frac{1}{|\mathbf{k}|}\left(\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} - \mathbf{e_k}\circ\mathbf{e_k}\right),$$

így az összegszabály jobb oldalán szereplő integrál

$$\int\frac{\mathrm{d}^2k}{2\pi^2}\,f(\varepsilon(\mathbf{k}))\,m_{\mathrm{eff}}^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{\gamma}{\hbar^2}\int_0^{k_F}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi^2}\,k\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\,\frac{1}{k}\left(\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\cos^2\varphi & \cos\varphi\cdot\sin\varphi\\ \cos\varphi\cdot\sin\varphi & \sin^2\varphi\end{pmatrix}\right)$$
$$= \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_0}{\hbar^2}\,\frac{1}{2\pi}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Tehát az összegszabály valóban teljesül.

11.5.6. Egy részecskére jutó energia szabad elektron gázban

Vezesd le, hogy egy-, két- illetve háromdimenziós szabad elektron gázban az egy részecskére jutó átlagos energia hányszorosa a Fermi-energiának!

Megoldás:

A szabad elektron gáz diszperziós relációja $\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, ahol m az elektronok effektív tömege. Az elektronok N számát és E összenergiáját d dimenzióban a következő két formulával kaphatjuk meg:

$$N = 2\int_{|\mathbf{k}|<k_F} \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d} = C\int_0^{k_F} \mathrm{d}k\, k^{d-1} = C\,\frac{k_F^d}{d},$$
$$E = 2\int_{|\mathbf{k}|<k_F} \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}\,\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} = C\,\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{k_F} \mathrm{d}k\, k^{d+1} = C\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{k_F^{d+2}}{d+2}.$$

Így az egy elektronra jutó átlagos energia

$$\overline{\varepsilon} = \frac{E}{N} = \frac{d}{d+2}\varepsilon_F = \begin{cases} \frac{\varepsilon_F}{3}, & \text{ha } d=1, \\ \frac{\varepsilon_F}{2}, & \text{ha } d=2, \\ \frac{3\varepsilon_F}{5}, & \text{ha } d=3. \end{cases}$$

11.6. Házi feladatok

19. házi feladat

Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot s atomi nívókkal, ahol az elektron sávszerkezet kis betöltésre a Γ pont közelében $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 6|t| + |t|(ak)^2$; t az elsőszomszéd átfedési integrál, a a rácsállandó, valamint ε_0 az s-nívó energiája. A p hidrosztatikai nyomás függvényében a t átfedési integrál $t = t_0 + \alpha p$ alakú. Számold ki a vezetési elektronok fajhőjárulékának nyomásfüggését!