

Szilárdtestfizika gyakorlat, beadandó házi feladatok

2011. őszi félév

1. feladat, 2. gyak.

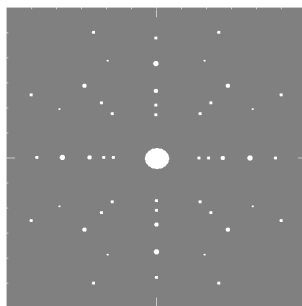
Szabályos háromszögrács esetén add meg az elemi rácsvektorokat, az általuk meghatározott elemi cellát és az ún. Wigner-Seitz cellát! Add meg a reciprok rács elemi rácsvektorait és mondd meg, milyen rácsot határoznak meg! Számold ki a direkt rács és a reciprok rács Wigner-Seitz cellájának területét! Megoldásodat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

2. feladat, 3. gyak.

Tekintsünk egy egyszerű négyzetes (primitív tetragonális) Bravais rácsot, ahol $\underline{a}_1 \perp \underline{a}_2 \perp \underline{a}_3$ és $|\underline{a}_1| = |\underline{a}_2| \neq |\underline{a}_3|$. A rács bázisa legyen egyatomos. A Neumann-elv segítségével és a kristály szimmetriáinak ismeretében mutasd meg, hány független eleme van a vezetőképesség tenzornak! Hogyan módosul a helyzet, ha az \underline{a}_3 körüli diszkrét forgásszimmetriát a bázis kétfogásúra csökkenti?

3. feladat, 3. gyak.

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!



1. ábra. Laue szórási kép

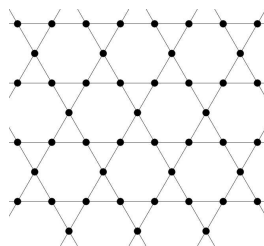
4. feladat, 4. gyak.

Tekintsük az *fcc* rácsú C_{60} molekula Röntgen szórási képét.

- Számítsd ki a C_{60} molekula atomi szórási tényezőjét ($f(\Delta\mathbf{k})$), feltételezve, hogy az elektronok a fullerén labda felületén egyenletes tötéssűrűséget létrehozva helyezkednek el. (Minden szénatomnak 6 elektronja van, a fullerén labda sugara 0.35nm.)
- Határozd meg a reciprok rácsot! Milyen $\Delta\mathbf{k}$ szórásvektorokra kapunk intenzitás-maximumokat az *fcc* rácson?

5. feladat, 4. gyak.

Tekintsd az ábrán látható *Kagome* rácsot. Mi a Bravais rács és hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezőjét, ha az atomi szórási tényező f . Okoz-e a szerkezeti tényező kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciprok rácsvektor esetén!



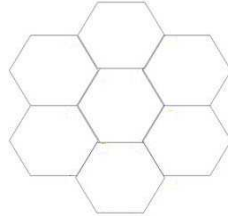
2. ábra. Kagome rács

6. feladat, 4. gyak.

A típusú atomokból álló egyszerű 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 négyzetrácsra jutunk.) Hány atomból áll a bázis? Számold ki a rugalmas röntgenszórás szerkezeti tényezőjét, ha az atomi szórás tényező a kétféle atomra f_A és f_B . Határozd meg, hogy milyen f_A/f_B aránynál okoz a szerkezeti tényező kioltást, azaz tiltott reflexiót valamely reciproktérvektor esetén! Mi ennek a magyarázata?

7. feladat, 6. gyak.

Vizsgáljuk a hatszögös grafit síkra merőleges kitéréseihez tartozó fononmódusait a megfeszített rugós modellben.



3. ábra. Grafit sík

- Határozd meg a bázist és az elemi rácsvektorokat! Hány atomból áll az elemi cella? Számítsd ki a reciproktérvektorok elemi rácsvektorait! Hány darab és milyen fononmódus(ok) van(nak) a rendszerben?
- Írd fel a bázisatomok mozgásegyenletét Fourier-térben általános \mathbf{q} hullámszámvektorra!
- Határozd meg a fononmódusok frekvenciáit és a hozzájuk tartozó atomi elmozdulás vektorokat $\mathbf{q} = 0$ -ra!
- Mutasd meg, hogy létezik olyan fononmódus, ahol csak az atomok fele végez rezgést! Mekkora az ehhez tartozó fononfrekvencia és mekkorák az egyes atomok elmozdulásvektorai?

8. feladat, 6. gyak.

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

9. feladat, 6. gyak.

Egy egydimenziós lánc felváltva elhelyezkedő A és B típusú atomokból áll, melyeket k_1 rugóállandójú, F_0 előfeszítésű rugó köt össze. Ezenkívül minden legközelebbi B típusú atom pár másodsomszéd k_2 rugóállandójú rugóval van összecsatolva.

- Írd fel a mozgásegyenleteket, a láncirányba, illetve az arra merőleges irányban.
- Határozd meg a diszperziós relációt $k_2 = 1/2k_1$ esetén. Hogyan értelmezhető egyszerűen a láncra merőleges esetben kapott eredmény?

10. feladat, 6. gyak.

Határozzuk meg 1,2 és 3 dimenzióban (3D-ben a Debye-modell diszperzióját használva) az első illetve 2 dimenzióban a második kifejezés értékét:

$$\int_0^\infty \frac{g(\omega)}{\omega} d\omega, \quad \int_0^\infty \frac{g(\omega)}{\omega(\exp(\beta\hbar\omega) - 1)} d\omega.$$

11. feladat, 7. gyak.

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

12. feladat, 9. gyak.

Tekintsünk egy L hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. A

rácsatom hatását közelítsük négyszögjel alakú potenciállal. Határozzuk meg a sávok között kialakuló tilos sávok szélességét!

13. feladat, 9. gyak.

Tekintsünk egy L hosszúságú, egydimenziós rácsban lévő elektronokat kvázi-szabad elektron közelítésben. A rácsatomok hatását közelítsük a következő periodikus potenciállal: $V(x) = V_0 \cdot \cos^3(4\pi \frac{x}{a})$.

- Mekkora a rácsállandó?
- Határozzuk meg a sávok között kialakuló tilos sávok szélességét!
- Mennyivel változik meg az alapállapot energiája ezen potenciál hatására?

14. feladat, 11. gyak.

Tekintsünk egy egydimenziós rácsot erősen lokalizált elektronokkal. A rácsatom hatását közelítsük Dirac-delta potenciállal. Határozzuk meg az atomi hullámfüggvény alakját!

15. feladat, 11. gyak.

Tekintsünk egy egydimenziós rácsot erősen lokalizált elektronokkal. A rácsatom hatását közelítsük Dirac-delta potenciállal. Ismert az atomi hullámfüggvény alakja:

$$\Psi(x) = \sqrt{\kappa} \exp(-\kappa|x|), \kappa = \frac{V_0 a m}{\hbar^2}.$$

Határozzuk meg az elektronok diszperziós relációját (a szoros kötésű közelítés alapján)!

16. feladat, 11. gyak.

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 .

- Adj meg egy lehetséges elemi bázisvektorrendszert! Add meg a elektron sávszerkezetet tight-binding - azaz szoros-kötésű - közelítésben másodsomszédig bezárólag!
- 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 sáv szélesség?

17. feladat, 12. gyak.

Tekintsünk egy háromdimenziós egyszerű köbös rácsot s -típusú atomi nívókkal, ahol az elektron sáv szerkezet kis betöltésre a Γ pont közelében $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - 6|t| + |t|(ak)^2$; 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!