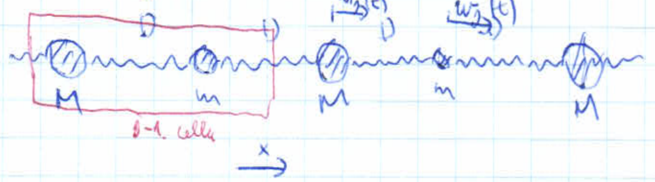
SZILF12

1. gyak (10.02.)

P1.

valamilyen (d-vel kezdődő) lánc



Mi az elemi cella? A két tömeg együtt

Mozgásegyenletek:

$$M\ddot{u}_j = D(w_j - u_j) + D(w_{j-1} - u_j)$$

$$M w_j = D(u_j - w_j) + D(u_{j+1} - w_j)$$

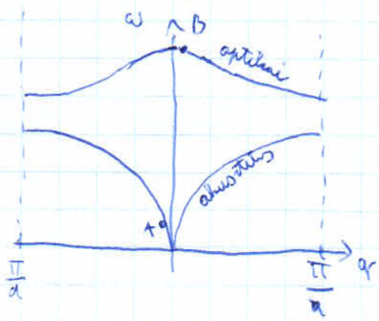
Fourier: $u_j(t) = A\, e^{-i\omega t} e^{iqaj}$

$w_j(t) = B\, e^{-i\omega t} e^{iqaj}$

behelyettesítve:

$$\left.\begin{aligned} -M\omega^2 A &= D(B-A) + D(e^{-iqa}B - A) \\ -M\omega^2 B &= D(A-B) + D(e^{iqa}A - B) \end{aligned}\right\} \to \text{egy 2D-s} \to \text{s.é. egyenlet}$$

A megoldás: $\omega^2_\pm = \frac{D}{mM}\left[m + M \pm \sqrt{m^2 + M^2 + 2mM\cos(qa)}\right]$



pd + pd ⇐ π szögű forgatási szimmetriával rendelkező képlet

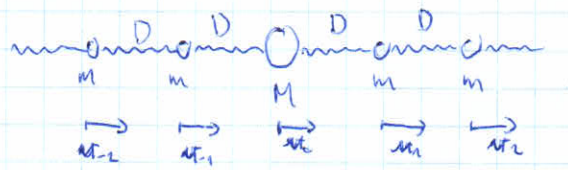
A) esetben a q kicsi ⇒ λ nagy ⇒ az összes szomszéd atom kb. ugyanúgy mozdul. Mivel a rugók összenyomódása kicsi, az energia is kicsi

B) pontban ugyanez, csak ellentétes az elmozdulás

A szélén vagy az egyik típusú tömegek állnak

P.2.

Mi van, ha csak egy M lenne?



$n = 0$: $M\ddot{v}_0 = D(v_1 - v_0) + D(v_{-1} - v_0)$

$n \neq 0$: $M\ddot{v}_n = D(v_{n+1} - v_n) + D(v_{n-1} - v_n)$

Fourier: $u_n(t) = A\, e^{-i\omega t} e^{iq|n|a}$

$q = i\alpha + \beta$

megoldásra azt kapjuk: $\frac{m\omega^2}{D} = 2(1 + \cos(\alpha a))$

$e^{\alpha a} = 2\frac{m}{M} - 1$

ha $2\frac{m}{M} - 1 > 1 \Rightarrow m > M$
$\Rightarrow$ vakancia

P.3

Lineáris lánc kvantálása

$$\hat{H} = \sum_j \left[\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} D \left(\hat{u}_j - \hat{u}_{j-1}\right)^2\right]$$

Fourier: $u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hat{u}(q) e^{iqja}$

periodikus HF: $\hat{u}_j = \hat{u}_{j+N}$

$\Rightarrow e^{iqNa} = 1 \Rightarrow q_n = \frac{2\pi}{Na} \cdot n$

$$\hat{u}(q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{u}_j e^{-iqja}$$

Tudjuk, hogy $\hat{u}_j = \hat{u}_j^+$ mert mérhető. Mi van $u^+(q)$-val

$$\hat{u}^+(q) = \left(\sum_j \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{u}_j e^{-iqja}\right)^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{u}_j^+ e^{iqja} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{u}_j e^{-i(-q)ja} = \hat{u}(-q)$$

Mi $\hat{p}$ Fourier-je? Elsőre:

$$\hat{p}(q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{p}_j e^{-iqja}$$

de ha $[\hat{u}_\ell, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{\ell j}$

akkor $[\hat{u}(q), \hat{p}(q')] \neq i\hbar \delta_{qq'}$

Akkor, hogy jó legyen: $\hat{p}(q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{p}_j e^{+iqja}$ kell

Transzf. a Hamilton:

kinetikus:
$$\sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2m} = \frac{1}{2mN} \sum_j \sum_{qq'} \hat{p}_j(q) \hat{p}_j(q') e^{-iqja} e^{-iq'ja} =$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{qq'} \hat{p}_j(q) \hat{p}_j(q') \delta_{q,-q'} = \frac{1}{2m} \sum_q \hat{p}(q) \hat{p}(-q)$$

potenciál hasonlóan:

$$\sum_j (u_j - u_{j-1})^2 = \sum_q \hat{u}(q) \hat{u}(-q) 2 \cdot (1 - \cos(qa))$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_q \hat{p}(q) \hat{p}(-q) + \underbrace{D \sum_q \hat{u}(q) \hat{u}(-q) [1 - \cos(qa)]}_{\frac{1}{2} m \sum_q \omega^2(q) \hat{u}(q) \hat{u}(-q)}$$

ha $\omega^2(q) = \frac{2D}{m}\left(1 - \cos(qa)\right)$

bevezetve: $\hat{a}_q^+ := \sqrt{\frac{m\omega(q)}{2\hbar}} \left[\hat{u}(-q) - \frac{i}{m\omega} \hat{p}(q)\right]$

$\hat{a}_q := \sqrt{\frac{m\omega(q)}{2\hbar}} \left[\hat{u}(q) + \frac{i}{m\omega} \hat{p}(-q)\right]$

$$\hat{H} = \sum_q \hbar\omega(q) \left(\hat{a}_q^+ \hat{a}_q + \frac{1}{2}\right)$$

$$[\hat{a}_q, \hat{a}_{q'}^+] = \delta_{qq'}$$

SZILFIZ

2. gyak (10.16.)

P1

Másodkvantált formalizmus

Ami az alap: $[a, a^+] = 1$

Hamilton a harm. osz. esetében: $H = \omega\left[a^+a + \frac{1}{2}\right]$

Lehetnek más tagok is:

pl.: $\hat{H} = \omega\left[a^+a + \frac{1}{2}\right] + \frac{\Delta}{2}\left[a^+a^+ + aa\right]$

Ha több a is szerepel, mint 2, akkor már KH is van, ilyen nem lesz.

Bogoliubov-trafó:

Minden 2a-t tartalmazó H-t visszavezetünk

$H = \Omega\left[b^+b + \frac{1}{2}\right]$ alakra. ez a-k lin. kombjával.

$b := u a + v a^+ \qquad (u, v \in \mathbb{R})$

$b^+ := u a^+ + v a$

Feltétel: • b-k is legyenek bozonikusak: $[b, b^+] = 1$

$\Rightarrow u^2 - v^2 = 1$

• bb és b^+b^+ tagok eh-ja 0 a H-ban.

más szavakkal: $[H, b] = [H, ua + va^+]$

$$\Rightarrow \Omega\left[b^+b - \tfrac{1}{2}, b\right] = -\Omega b \overset{!}{=} \omega\left[a^+a + \tfrac{1}{2}, ua + va^+\right] + \frac{\Delta}{2}\left[a^+a^+ + aa, ua + va^+\right] =$$

$$= u(-\omega a - \Delta a^+) + v(\omega a^+ + \Delta a)$$

$$\Rightarrow \begin{array}{l} -\Omega u = -\omega u + v\Delta \\ -\Omega v = -\Delta u + v\omega \end{array} \Rightarrow \begin{pmatrix} \Omega - \omega & \Delta \\ -\Delta & \Omega + \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \Omega = \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}$$

$$\Rightarrow u^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}\right) \quad v^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}\right)$$

P. 2

Anti ferromágneses van: $\hat{H} = J\sum_{\langle i,j\rangle} \hat{S}_i \hat{S}_j$ $\qquad J>0$

Kvalitatívan dolgozunk, van ideális Neel-állapot.

i és j indexel az ellentétes állapotokon megyen végig!

$$\hat{H} = J'\sum_{\langle i,j\rangle}\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z\right)$$

Váltsunk léptető módba: $S_j^{\pm} = S_j^x \pm i S_j^y$

Ezekkel: $$\hat{H} = J\sum_{j,\sigma}\left[\frac{1}{2}\left(S^+_{aj} S^-_{bj+\sigma} + S^-_{aj} S^+_{bj+\sigma}\right) + \Delta S^z_{aj} S^z_{bj+\sigma}\right]$$

a és b azt mutatja, hogy melyik melyik rácson van (az csak formalitás)

j az a-rács elemein megy végig

σ azt mutatja melyik szomszéd (6-féle értéke lehet, mert kockarács)

Klasszikus megoldás:

Az alapállapot a Neel-állapot.

Véges T-n ennek precessziója => Spinhullám (A precesszálásban van némi fáziskülönbség a szomszédok között)

Kvantumos:

A Neel-állapot nem sajátállapot, de egy jó közelítés.

Legyen a „felfelé" a z tengely, tehát a Neel-állapotban: $\hat{S}^z_{aj} = S$

$\hat{S}^z_{bj} = -S$

A többi operátor már bonyolult, ezért egy fermionszerű vagy bozonszerű kell őket (most bozonszerűek)

$$S^+_{aj} = \sqrt{2S}\, a_j \;,\quad S^-_{aj} = \sqrt{2S}\, a_j^+$$

$$S^+_{bl} = \sqrt{2S}\, b_l \qquad S^-_{bl} = \sqrt{2S}\, b_l^+$$

Ez nyilván nem pontos, de elég jó közelítés. Vannak elegánsabb konstrukciók, de tárgyalásuk nem lesz.

Írjuk be ezeket a $\hat{H}$-ba:

$$\hat{H} = -N + \Delta z S^2 + JS\sum_{j\sigma}\left[a_j b_{j+\sigma} + a_j^+ b^+_{j+\sigma} + \Delta\left(a_j^+ a_j + b^+_{j+\sigma} b_{j+\sigma}\right)\right]$$

N: spinek száma

z: szomszédok száma (6)

Írjuk át $\hat H$-t Fourier-be!

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}} e^{-i\underline{k}\underline{R}_j} \qquad b_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} b_{\underline{k}} e^{i\underline{k}\underline{R}_l}$$

Ezekkel: $\sum_j a_j^\dagger a_j = \sum_k a_k^\dagger a_k$

$$\sum_j a_j^\dagger b_{j+\delta} = \sum_k a_k^\dagger b_k e^{i\underline{k}\underline{\delta}}$$

$$\hat H = -NJ\Delta z S^2 + JSz \sum_k \gamma_k \left[\left(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger \right) + \Delta \left(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) \right]$$

ahol $\gamma_k = \frac{1}{z} \sum_\delta e^{i\underline{k}\underline{\delta}} = \frac{1}{3}\left(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a \right)$

Alkalmazzuk most a Bogoljubov-ot:

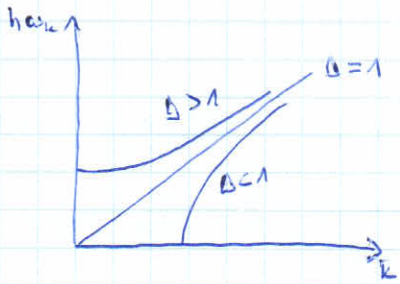
$$a_k = u_k \alpha_k + v_k \beta_k^\dagger \qquad b_k = u_k \beta_k + v_k \alpha_k^\dagger$$

$$a_k^\dagger = u_k \alpha_k^\dagger + v_k \beta_k \qquad b_k^\dagger = u_k \beta_k^\dagger + v_k \alpha_k$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 - \gamma_k^2}} + 1 \right] \qquad v_k^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 - \gamma_k^2}} - 1 \right]$$

$$H = E_0 + \sum_k \hbar\omega_k \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k + 1 \right)$$

ahol $\hbar\omega_k = JSz\sqrt{\Delta^2 - \gamma_k^2}$



Mindegyik vonal 2x degenerációjú

Nézzük a $\Delta = 1$ esetet $ka \ll 1$-re:

$$\gamma_k \approx 1 - \frac{k^2 a^2}{2 \cdot 3} \qquad \hbar\omega_k = JSz\sqrt{1 - 1 + \frac{k^2a^2}{2\cdot 3}} = JSa k \sim k$$

P.3

Kicserélődés félig töltött Hubbard-modellben.

Két elektront pakolok rá (valamire)

Egy site-on 2 elektron van és 2 site van.

A lehetséges állapotok: $|\uparrow,\uparrow\rangle$; $|\downarrow,\downarrow\rangle$; $|\uparrow,\downarrow\rangle$; $|\downarrow,\uparrow\rangle$; $|0,\uparrow\downarrow\rangle$; $|\uparrow\downarrow,0\rangle$

Hogy néz ki a $\hat{H}$? ahol ugyanazon a site-on van ott van U Coulomb-taszítás.

Az offdiagonális elemeket számoljuk, hogy az elektron ugrálhat.

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & U & \\ & & & & & U \end{pmatrix}$$

$$H_{tun} = t \sum_\sigma c^+_{1\sigma} c_{2\sigma} + c^+_{2\sigma} c_{1\sigma})$$

Cserélget az elektront ott ugrálni, ahol a Pauli-elv nem tiltja az átugrást.

Az ⓔ elemet számoljuk ki:

$$\langle 0,\downarrow\uparrow | H_{tun} | \uparrow,\downarrow\rangle \qquad \text{ahol} \quad |\uparrow,\downarrow\rangle = c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} |0\rangle$$
$$|0,\downarrow\uparrow\rangle = c^+_{2\downarrow} c^+_{2\uparrow} |0\rangle$$

$$\langle 0| c_{2\uparrow} c_{2\downarrow} H_{tun} c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} |0\rangle$$

A $\hat{H}_{tun}$-ból csak egy tag fontos: $t\, c^+_{2\uparrow} c_{1\uparrow}$ a többi 0-t ad.

Mivel σ-ban nem megy, a kommutál: $\{c_i, c^+_j\} = \delta_{ij}$

$$t\langle 0| c_{2\uparrow} c_{2\downarrow} c^+_{2\uparrow} c_{1\uparrow} c^+_{1\uparrow} c^+_{2\downarrow} |0\rangle = t\langle 0| c_{2\uparrow} c_{2\downarrow} c^+_{2\uparrow} (1 - c^+_{1\uparrow} c_{1\uparrow}) c^+_{2\downarrow} |0\rangle =$$

a 2. tag 0-t ad, mert ez $c_{1\uparrow}$ elfogyott a vákuum-on, az 0.

$= $ folytatva a cserélgetést $= -t$

A Hamilton:
$$\begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & 0 & & -t & -t \\ & & & 0 & t & t \\ & & -t & t & U & \\ & & -t & t & & U \end{pmatrix}$$

Csináljunk perturbációszámítást. Az energiaszintek:

Kvázi degenerált perturbációszámítás (Schrieffer-Wolff-transzf. v. Löwdin-féle mód)

Az ezzel legyártott effektív Hamilton:

$$
\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -\frac{2t^2}{U} & \frac{2t^2}{U} \\
0 & 0 & \frac{2t^2}{U} & -\frac{2t^2}{U}
\end{pmatrix}
&
\begin{array}{l}
|\uparrow,\uparrow\rangle \\
|\downarrow,\downarrow\rangle \\
|\uparrow,\downarrow\rangle \\
|\downarrow,\uparrow\rangle
\end{array}
\end{array}
$$

Ez már egy lehetne antiferromágneses modell.

$J\underline{S}_1\underline{S}_2 = J\left(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z\right)$ ez mátrixban:
$$
\begin{pmatrix}
\frac{J}{2} & & & \\
 & \frac{J}{2} & & \\
 & & & \frac{J}{2} \\
 & & \frac{J}{2} &
\end{pmatrix}
$$

Ha $J = \frac{4t^2}{U}$ akkor a két modell u.a. csak van egy $\frac{J}{2}\cdot\mathbb{1}$ [illegible]-energia.

SZILFIZ

3. gyak (11.06.)

<u>Sávszerkezetek</u>

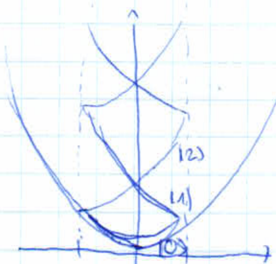
Általában DFT, de azt nem lehet táblán

2 modell: · szabad elektron modell
· szoros kötés

① Szabad elektron modell

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

üres rács közelítés: a potenciál még mindig 0, de megtörni a folytonos transzlációs szimmetriát
⇒ A BZ-n kívüli pontokat nem ábrázoljuk, mert az úgyis ekvivalens egy BZ-n belülivel



Különböző sávok vannak, ami alapján már lehet konstruálni Hamiltont

$$H_k=\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2k^2}{2m} & & & \\ & \frac{\hbar^2\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2}{2m} & & \\ & & \frac{\hbar^2\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2}{2m} & \\ & & & \ddots\end{pmatrix}\begin{matrix}|0\rangle \\ |G=\frac{2\pi}{a}\rangle \\ | \\ \end{matrix}$$

Az bázisállapotok: $|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}$ $\quad |G\rangle=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{i\underline{G}\underline{r}}$

Ez alapból diagonális, de ha van potenciál is, akkor megjelennek a $\langle\underline{G}+\underline{k}|U|\underline{k}\rangle=\langle\underline{G}|U|0\rangle$ mátrixelemek

Mivel a potenciál energiaeltolható, ezért a főátlói elemei kinullázható

Az, hogy kicsi, azt jelenti, hogy kisebb, mint a tipikus távolság: $U\ll\frac{\hbar^2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2}{2m}$

A természet nem szereti a kereszteződést (csak ha van szimmetria), ezért a kereszteződések felhasadnak.

Kérdés: Mekkora a felhasadás az a $|0\rangle$ és $|1\rangle$ között

$$H_k=\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2k^2}{2m} & \langle G|U|0\rangle \\ \langle 0|U|G\rangle & \frac{\hbar^2\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2}{2m}\end{pmatrix}\Bigg|_{k=\frac{\pi}{a}}=\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}{2m} & w \\ w^* & \frac{\hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}{2m}\end{pmatrix}$$

$$\varepsilon_\pm=\frac{\hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}{2m}\pm w\implies\varepsilon_{gap}=2w$$

P1. Mekkora a felhasadás, ha $U(x) = U_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$

$$2w = 2\langle G|U|0\rangle = 2\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i\frac{2\pi}{a}x} \frac{U_0}{2}\left(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\right) \frac{1}{\sqrt{L}}\, dx =$$

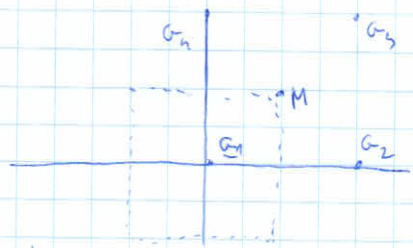
$$= \frac{U_0}{L}\left(\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left(1 + e^{-i\frac{4\pi}{a}x}\right) dx\right) = U_0(1+0) = U_0$$

Tanulság: a felhasadások az $U(x)$ Fourier-jai.

P.2.

2D modell: A potenciál mindenhol 0 kivéve a rácspontok körül kis körökben $-V_0$

Az M pontban 4-szeres deg. van. Hogy oldódik fel a Muffin-tin potenciálra?



$$\underline{G}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \underline{G}_2 = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} \\ 0 \end{pmatrix} \qquad G_3 = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} \end{pmatrix} \qquad G_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2\pi}{a} \end{pmatrix}$$

$$\langle G_1|U|G_2\rangle = N \int_{EC} \frac{1}{\sqrt{Na^2}} e^{-iG_1 r}\, U(r) \frac{1}{\sqrt{Na^2}} e^{iG_2 r}\, d^2r =$$

$$= \frac{1}{a^2}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{r=0}^{r_0} (-V_0)\, e^{i\frac{2\pi}{a}r\cos\varphi}\, r\, dr\, d\varphi =$$

$$= -\frac{V_0}{a^2}\int_{r=0}^{r_0}\int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-i\frac{2\pi}{a}r\cos\varphi}\, d\varphi\, r\, dr = -\frac{V_0}{a^2} 2\pi \int_{r=0}^{r_0} J_0\left(\frac{2\pi}{a}r\right) r\, dr =$$

$$= -\frac{2\pi V_0}{a^2}\frac{r_0}{\frac{2\pi}{a}} J_1\left(\frac{2\pi}{a}r_0\right) = -V_0\frac{r_0}{a}J_1\left(\frac{2\pi}{a}r_0\right) =: p$$

Belátható, hogy $\langle G_i|M|G_j\rangle$ és az ez tengelyen a szomszédi

a mátrix elemei: $q := -\frac{V_0}{\sqrt{2}}\frac{r_0}{a}J_1\left(\frac{2\pi}{a}r_0\right)$

$$H_{k=M} = \begin{pmatrix} \alpha & p & q & p \\ p & \alpha & p & q \\ q & p & \alpha & p \\ p & q & p & \alpha \end{pmatrix}$$

Ennek kell megoldani a SÉP-jét.

sajátvektorai: $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \alpha + 2p + q$; $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \alpha - q$; $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \alpha - q$; $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \alpha + q - 2p$

$$4\times \begin{cases} \to 2\times \\ \to 1\times \\ \to 1\times \end{cases}$$

② Sávos leírás

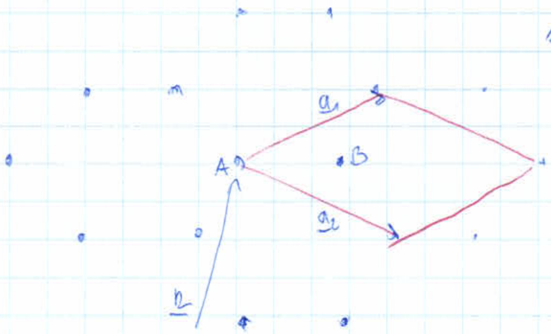
1D lánc: $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + 2t\cos ka$ (Vígh Máté-videó)

P.S

Grafén:

szénatom: $1s^2 2s^2 2p^2 \to 1s^2 2s 2p^3$

$\Rightarrow$ tetraéder szerint.



A pályák kis konfigurációja a megoldás:  (hogy kémiában)

mutat szerkezeti irányba, amire a h. rács. Ennek a szénszerkezetét vizsgálja.

Keressük meg az elemi cellát! piros

két szénatom: A és B

Hullámfv

$$\psi_k(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\underline{R}} e^{i\underline{k}\underline{R}}\left[c_A(k)\varphi_A(\underline{r}-\underline{R}) + c_B(\underline{k})\varphi_B(\underline{r}-\underline{R}-\underline{d})\right]$$

TB közelítés: sok mindent kihanyagolunk

$$\int \varphi_A^*(\underline{r}-\underline{R})\varphi_A(\underline{r}-\underline{R}')d^3\underline{r} = \delta_{\underline{R},\underline{R}'}$$

$$\int \varphi_A^*(\underline{r}-\underline{R})\varphi_B(\underline{r}-\underline{R}'-\underline{d})d^3\underline{r} = 0$$

$$\int \varphi_A^*(\underline{r}-\underline{R})\hat{H}\varphi_A(\underline{r}-\underline{R}')d^3\underline{r} = \varepsilon_0\delta_{R,R'}$$

$$\int \varphi_A^*(\underline{r}-\underline{R})\hat{H}\varphi_B(\underline{r}-\underline{R}'-\underline{d})d^3\underline{r} = t\left(\delta_{R,R'} + \delta_{R',R-a_1} + \delta_{R',R-a_2}\right)$$

A Schr.: $H\psi_k = \varepsilon_k\psi_k$

Ha ráintegrálunk $\int \varphi_A^*(\underline{r}-\underline{R}')d^3\underline{r}$-rel, akkor olyan tagokat kapunk, mint az előbb:

$$\varepsilon_0 c_A + t f(k) c_B = \varepsilon_k c_A \quad (1)$$

Ha $\int \varphi_B^*(\underline{r}-\underline{R}'-\underline{d})d^3r$-rel integrálunk

$$t f^*(k) c_A + \varepsilon_0 c_B = \varepsilon_k c_B \quad (2)$$

Ez egy SÉP: $\begin{pmatrix} \varepsilon_0 & t f(k) \\ t f^*(k) & \varepsilon_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = \varepsilon_k \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} \Rightarrow \varepsilon_k = \varepsilon_0 \pm t|f(k)|$

Plusz még dolog: A BZ-ben k vektorok száma N.

sávonként 2N e^- fér el (Pauli-elv miatt). szénatomonként 2 e^--t van

$\Rightarrow \varepsilon_F = \varepsilon_0$

SZIL FIZ

4 gyak (11.20)

Mágneses térben mozgó részecske félklasszikus leírása

$\hbar\omega_c = \frac{qe}{2m} B << \Delta$

Klasszikus egyenlet:

$$\underline{F}_L = -e(\underline{v} \times \underline{B})$$
$$\downarrow$$
$$\dot{\underline{p}} = \hbar \dot{\underline{k}}$$

csoportsebesség: $\underline{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\underline{k})}{\partial \underline{k}}$

Diffegyenlet $\underline{k}$-ra: $\hbar \dot{\underline{k}} = \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\underline{k})}{\partial \underline{k}} \times \underline{B}\right) \cdot (-e)$

P1.

Olyan szilárdtest részben, amelyben az effektív tömeg irányfüggő:

$\varepsilon = \frac{\hbar k^2}{2m}$ lenne szabad e^- esetén

itt: $\varepsilon = \frac{\hbar}{2} \underline{k}\, \underline{\underline{M}}^{-1} \underline{k}$ $\quad$ $\underline{\underline{M}}$: szimmetrikus tömegtenzor

$\underline{v}_g = \hbar \underline{\underline{M}}^{-1} \underline{k} \Rightarrow \underline{k} = \frac{1}{\hbar} \underline{\underline{M}}\, \underline{v}$

Végül a mozgásegyenlet:

$$\underline{\underline{M}}\, \dot{\underline{v}} = -e(\underline{v} \times \underline{B})$$

ansatz: $\underline{v}(t) = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} e^{i\omega_c t}$

Beírva:
$$\underline{\underline{M}} \cdot \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} i\omega_c e^{i\omega_c t} = -e \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} e^{i\omega_c t}$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = -\frac{e}{i\omega_c} \begin{pmatrix} v_y B \\ v_x B \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} + \frac{eB}{i\omega_c} & M_{13} \\ M_{21} - \frac{eB}{i\omega_c} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \det = 0$$

$$\det \underline{\underline{M}} + \frac{eB}{i\omega_c} \begin{vmatrix} M_{12} & M_{13} \\ M_{32} & M_{33} \end{vmatrix} - \frac{eB}{i\omega_c} \begin{vmatrix} M_{21} & M_{23} \\ M_{31} & M_{33} \end{vmatrix} + \left(\frac{eB}{i\omega_c}\right)^2 M_{33} = 0$$

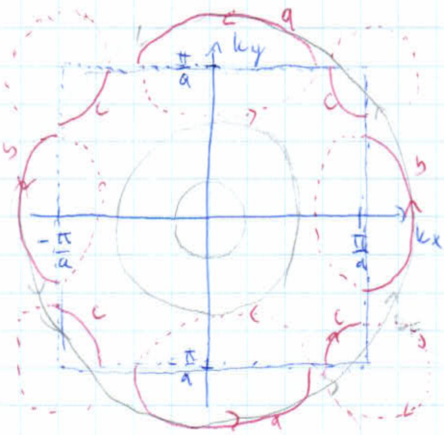
$$\Rightarrow \omega_c = \sqrt{\frac{e^2 B^2 M_{33}}{\det \underline{\underline{M}}}} = eB \sqrt{\frac{M_{33}}{\det \underline{\underline{M}}}} \qquad m_c := \sqrt{\frac{\det \underline{\underline{M}}}{M_{33}}} \Rightarrow \omega_c = \frac{eB}{m_c}$$

ellipszis pálya

<u>P.2.</u>

2D négyzetrácsos, kvázi-szabad e^--közelítés, $\perp$ mágneses tér, 2 $\frac{e^-}{\text{cella}}$

Kérdés: mennyi a ciklotron tömeg?



k lehetséges értéke N, tehát a BZ-be összesen 2N e^- fér.

Nekünk cellánként 2 e^--nk van, így a teljes BZ-t feltöltenénk.

Mekkora az ε_F? Akkora, hogy a betöltött terület a BZ területével egyezzen: $k_F^2 \pi \overset{!}{=} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$

$$\Rightarrow k_F = \frac{2\sqrt{\pi}}{a}$$

Üres rács esetén egy k_F sugarú körpálya lenne, és $m_c = m_e$ lenne.

Itt viszont a k_F kör a pot. miatt feldarabolódik.

3 zárt hurok (a, b és c) $\Rightarrow$ 3 különböző ciklotron tömeg

Előadás alapján: $m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}$

Szimmetria miatt $m_{c_a} = m_{c_b}$

továbbá, ε_F növelésével A_a és A_b nő, A_c csökken

$\Rightarrow m_{c_{a,b}} > 0$ „elektron"-állapot

$m_{c_c} < 0$ lyuk állapot

Fizikai tartalom: A lyukaknál a körüljárás is ellentétes, továbbá ezeknél a betöltött állapotok nem belül, hanem kívül vannak.

Nem számoljuk ki egyenként, de nekünk elég:

$A_{BZ} = A_{FC} + A_c - 2A_{a,b}$ (*) hiszen $A_{FC} = A_{BZ}$ volt, de mivel a deriváltak kellenek, ez is kell.

$A_{FC} = k^2 \pi = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \pi$

deriváljuk (*)-t: $\frac{\hbar^2}{2\pi}\frac{\partial}{\partial \varepsilon}$

$$0 = \frac{2m\pi}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2\pi} + m_c - 2m_a \Rightarrow \boxed{m + m_c - 2m_a = 0}$$

A_a területét számolva: ez egy körszelet, és körívszakasz, de nem írjuk le. (Fúj geometria)

$$\boxed{\begin{aligned} m_a &= 0{,}3\, m_e \\ m_c &= -0{,}4\, m_e \end{aligned}}$$

Erős mágneses tér (itt már nem működik a félklasszikus)

$\underline{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \Rightarrow$ különféle gauge-el:

– Landau-mérték: $\underline{A} = \begin{pmatrix} -By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

– szimmetrikus mérték: $\underline{A} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -By \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$

$H = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ volt eddig, de mágneses tér esetén $\frac{(\underline{p} + e\underline{A})^2}{2m}$

$$H = \frac{1}{2m}\Big[\underbrace{\left(p_x - \tfrac{1}{2}eBy\right)}_{=:p}{}^2 + \underbrace{\left(p_y + \tfrac{1}{2}eBx\right)}_{=:r}{}^2\Big]$$ ← ezt akarjuk megoldani

tehát $H_\perp = \frac{p^2}{2m} + \frac{r^2}{2m}$ (z irányú szabad H van, az triviális, függetlenül van úgyis mivel)

bevezetve: $a = u r + i w p$

$a^+ = u r - i w p \Rightarrow H_\perp = \hbar\omega_c\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$

Az energiaszintek $\hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$

hullámfv.:

$z := x + iy \qquad z^* = x - iy$

$\Rightarrow x = \frac{z + z^*}{2} \qquad y = \frac{z - z^*}{2i}$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2}\left[\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right]$$

$$H_\perp = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left[2\frac{\partial}{\partial z^*} - \frac{1}{2\ell_B^2}z\right]}_{\hat{D}_1}\underbrace{\left[2\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2\ell_B^2}z^*\right]}_{\hat{D}_0} + \frac{\hbar\omega_c}{2}$$ ahol $\ell_B^2 = \frac{\hbar}{eB}$

Alapállapot az, amely $\hat{D}_0 \psi_{0m} = 0 \Rightarrow \psi_{0m} = z^{*m} e^{-\frac{|z|^2}{4\ell_B^2}}$

belátható, hogy $\hat{D}_1$ léptet: $\hat{D}_1 \psi_{0m} = \psi_{1m}$

ψ_{0m} polár koordinátákkal: $\psi_{0m}(r, \varphi) = r^m e^{im\varphi} e^{-\frac{r^2}{4\ell_B^2}}$ ahol m egész.

$$m_{max} + 1 = \frac{\pi R^2}{2\pi\ell_B^2}$$

SZILFIZ

9. gyak (11.27.)

Elektromos vezetőképesség

$$\underline{j} = \underline{\underline{\sigma}}\, \underline{E}$$

AC és DC vezetőképesség is létezik

AC esetén $\underline{\underline{\sigma}}(\omega) \in \mathbb{C}$

P.1.

Neumann-elv: Ha a kristálynak van szimmetriája, akkor az a makroszkópikus mennyiségekben is megjelenik (pl.: $\underline{\underline{\sigma}}$-ban)

pl.: 3-fogású forgásszimmetria

2D-ben:

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

Ha nincs szimmetria, akkor ezek mind függetlenek

„szegény ember csoportelmélete"

3 fogásos forgásszimmetria:

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

C_3 változatlanul hagyja σ-t:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C_3}}\, \underline{\underline{\sigma}}\, \underline{\underline{C_3}}$$

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

Ezt kiszámolva:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \text{ és } \sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$$

P.2

Mi van tükörszimmetriával

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$$

Tehát tükörszimmetria esetén nincs Hall-effektus.

Ez hogy lehet? Úgy, hogy itt nincs mágneses tér, mert az a tükörszimmetriát elrontja.

ami nem szerepel a táblán.

Boltzmann-egyenlet:

$$\underline{\underline{\sigma}} = e^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^2}\, \tau\, \underline{v}(\underline{k}) \circ \underline{v}(\underline{k}) \underbrace{\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)\Big|_{\varepsilon=\varepsilon(\underline{k})}}_{\approx\, \delta(\varepsilon-\varepsilon_F)}$$

(2D-ben $\frac{d^2k}{2\pi^2}$)

P.3.

2D e⁻ gáz

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \underline{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{k}} = \frac{\hbar}{m}\begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \frac{\underline{k}}{m}$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2\tau}{2\pi^2}\int d^2\underline{k}\, \frac{\hbar^2 k_x^2}{m^2}\,\delta(\varepsilon-\varepsilon_F) = \frac{e^2\tau\hbar^2}{2m^2\pi^2}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{k=0}^{\infty} k^2\cos^2\varphi\, \delta(\varepsilon-\varepsilon_F)\cdot k\,dk\,d\varphi =$$

$$= \frac{e^2\tau\hbar^2}{2m^2\pi}\int_0^{\infty} \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\,\delta(\varepsilon-\varepsilon_F)\frac{m}{\hbar^2}\,d\varepsilon = \frac{e^2\tau}{\hbar\pi}\,\varepsilon_F$$

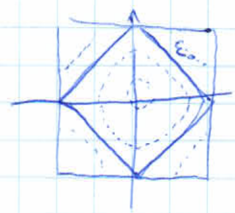
Ez pont a Drude-vezetőképesség

P.4.

Négyzetrács

$$\varepsilon(\underline{k}) = \varepsilon_0 - 2t\cos(k_x a) - 2t\cos(k_y a)$$ (ez a tight binding modellből jön)

Négyfogású szimmetria miatt $\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$ alakú



$$\hbar\underline{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{k}} = \begin{pmatrix} 2ta\sin(k_x a) \\ 2ta\sin(k_y a) \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2\tau}{2\pi^2}\int 4t^2a^2\sin(k_x a)\,\delta(\varepsilon-\varepsilon_0)\,d^2\underline{k}$$

elég a négy középvonalon integrálni, és aztán [illegible] járulékot ad.

A δ ezután:

$$\delta\big(2t\cos(k_x a) + 2t\cos(k_y a)\big) =$$

$$= \sim \delta\left(k_x + k_y - \frac{\pi}{a}\right)$$

Mivel $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{f'(x_i)}$

mindegy, végig lehet számolni ...

$$\sigma_{xx} = \frac{8e^2\tau t}{\pi^2\hbar^2}$$

Meg ennyi volt és csinált...

ahol a vezetőképesség: $\sigma = \frac{e^2\tau}{4\pi^2\hbar}\int v\cdot dS_{\varepsilon_F}$

Ezzel az új módszerrel nyugvunk a valódi:

2D e^--gáz:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad v = \frac{\hbar k}{m} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$$

A Fermi mint egy kör $\Rightarrow$ α-val paraméterezzük:

$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{4\pi^2 \hbar} \int_0^{2\pi} k_F \frac{\hbar k_F}{m}\, d\alpha = \frac{e^2 \tau\, \varepsilon_F}{\pi \hbar}$$

Négyzetrács:

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} = \frac{2ta}{\hbar} \sqrt{\sin^2 k_x a + \underbrace{\sin^2 k_y a}_{\sin^2(-k_x a + \pi) = \sin^2(k_x a)}} = \frac{2\sqrt{2}\, t a \sin(k_x a)}{\hbar}$$

$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{4\pi^2 \hbar} \cdot 4 \int_0^{\pi/a} \frac{2\sqrt{2}\, t a \sin(k_x a)}{\hbar} \cdot \sqrt{2}\, dk_x = 4 \frac{e^2 \tau\, t a}{\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{2}{a}$$