

Szilárdtestek elektronszerkezete házi feladat

Okvátovity Zoltán

2018. január 15.

1. Feladat

Egy egyszerű köbös rácson a ΓX vonalon az energia 4-szeresen degenerált lesz

$$\epsilon_{D,E,F,G}(\mathbf{k}) = \epsilon_0 (\kappa^2 + 4) \quad (1)$$

energiával, ahol $\mathbf{k} = \frac{\pi}{a} (0, 0, \kappa)$ ($0 < \kappa < 1$). Az ezekhez tartozó hullámfüggvények a következők:

$$\varphi_D(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}(\kappa z + 2x)} \quad (2)$$

$$\varphi_E(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}(\kappa z + 2y)} \quad (3)$$

$$\varphi_F(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}(\kappa z - 2x)} \quad (4)$$

$$\varphi_G(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}(\kappa z - 2y)} \quad (5)$$

Degenerált perturbációszámítás (a rész)

A négyszeresen degenerált sáv felhasad, ha megjelenik egy kis $V(\mathbf{r})$ potenciál. A felhasadás meghatározásához meg kell adni a $V(\mathbf{r})$ potenciálból adódó mátrixelemeket, amiket a következő módon kaphatunk meg:

$$V_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = \frac{1}{V\epsilon_0} \int e^{-i\mathbf{K}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} = \frac{1}{V\epsilon_0} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\mathbf{r}} \quad (6)$$

Itt $\mathbf{K}$ illetve $\mathbf{K}'$ a következők lehetnek: $\frac{2\pi}{a} (\pm 1, 0, 0)$ vagy $\frac{2\pi}{a} (0, \pm 1, 0)$. A potenciált leosztottuk ϵ_0 -val, hogy dimenziótlan mennyiséget kapjunk.

A fentiek alapján a Hamilton-operátor a következő 4×4 mátrix alakban írható fel:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & V(1, -1, 0) & V(2, 0, 0) & V(1, 1, 0) \\ V(1, -1, 0) & \epsilon(\mathbf{k}) & V(1, 1, 0) & V(0, 2, 0) \\ V(2, 0, 0) & V(1, 1, 0) & \epsilon(\mathbf{k}) & V(-1, -1, 0) \\ V(1, 1, 0) & V(0, 2, 0) & V(-1, -1, 0) & \epsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (7)$$

Az offdiagonális mátrixelemek argumentumai a $\mathbf{K} - \mathbf{K}'$ lehetséges értékeit mutatják $2\pi/a$ faktortól eltekintve, $\epsilon(\mathbf{k})$ az (1)-ben lévő energiaértékek dimenziótlanítva.

Mivel a kristályban köbös szimmetria van ezért a mátrix nagy mértékben leegyszerűsödik. A nem diagonális elemek valóságosak lesznek, és könnyű belátni, hogy a C_4 forgatási szimmetria miatt $V_1 = V(1, -1, 0) = V(1, 1, 0) = V(-1, -1, 0)$ és $V_2 = V(2, 0, 0) = V(0, 2, 0)$, tehát csak két független mátrixelem marad. Így a Hamilton-operátor mátrixa tovább egyszerűsödik:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & V_1 & V_2 & V_1 \\ V_1 & \epsilon(\mathbf{k}) & V_1 & V_2 \\ V_2 & V_1 & \epsilon(\mathbf{k}) & V_1 \\ V_1 & V_2 & V_1 & \epsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (8)$$

A (8) kifejezést átírhatjuk másik alakra:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{k}) I_{4 \times 4} + \epsilon_0 \begin{pmatrix} 0 & V_1 & V_2 & V_1 \\ V_1 & 0 & V_1 & V_2 \\ V_2 & V_1 & 0 & V_1 \\ V_1 & V_2 & V_1 & 0 \end{pmatrix} = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{k}) I_{4 \times 4} + \epsilon_0 \underline{\underline{V}} \quad (9)$$

	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	1
E	2	0	2	0	0

1. táblázat. C_{4v} karaktertáblája

A felhasadás meghatározásához a $\underline{V}$ mátrix sajátértékeit kell meghatározni, ami a következő karakterisztikus egyenletre vezet:

$$\det(\underline{V} - \lambda I_{4 \times 4}) = \lambda^4 - 4\lambda^2 V_1^2 - 2\lambda^2 V_2^2 - 8\lambda V_1^2 V_2 - 4V_1^2 V_2^2 + V_2^4 \quad (10)$$

$$= (\lambda^2 - V_2^2)^2 - 4V_1^2 (\lambda + V_2)^2 \quad (11)$$

$$= (\lambda + V_2)^2 \left((\lambda^2 - V_2^2)^2 - 4V_1^2 \right) \quad (12)$$

$$= (\lambda + V_2)^2 (\lambda^2 - V_2 - 2V_1) (\lambda^2 - V_2 + 2V_1) = 0 \quad (13)$$

A kapott polinom szorzatalakjából leolvashatók a sajátértékek, amelyek rendere: $\lambda_{1,2} = -V_2$, $\lambda_3 = V_2 + 2V_1$ és $\lambda_4 = V_2 - 2V_1$. Ezekből a felhasadt állapotok energiái:

$$\epsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \epsilon_0 (\kappa^2 + 4 - V_2) \quad (14)$$

$$\epsilon_3(\mathbf{k}) = \epsilon_0 (\kappa^2 + 4 + V_2 + 2V_1) \quad (15)$$

$$\epsilon_4(\mathbf{k}) = \epsilon_0 (\kappa^2 + 4 + V_2 - 2V_1) \quad (16)$$

Tehát tényleg egy 2-szeresen degenerált és két nem degenerált pályára hasad fel a rendszer.

A hullámfüggvényeket meghatározhatjuk az eredeti degenerált állapotok lineáris kombinációjaként. Ehhez elég meghatározni a (8)-ben kapott mátrix sajátvektorait: $\mathbf{v}_i = (d_i, e_i, f_i, g_i)$. Ha visszahelyettesítjük a sajátértékeket (8)-ba a következő megoldásokat kapjuk a sajátvektorokra:

$$\mathbf{v}_1 = (1, 1, -1, -1) \quad (17)$$

$$\mathbf{v}_2 = (1, -1, -1, 1) \quad (18)$$

$$\mathbf{v}_3 = (1, 1, 1, 1) \quad (19)$$

$$\mathbf{v}_4 = (1, -1, 1, -1) \quad (20)$$

Ezekből a normálás és egyszerűsítés után megkapjuk a keresett hullámfüggvényeket.

$$\varphi_1(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \left(\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right) \quad (21)$$

$$\varphi_2(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \left(\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right) \quad (22)$$

$$\varphi_3(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right) \quad (23)$$

$$\varphi_4(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right) \quad (24)$$

Szimmetria vizsgálat (b rész)

Ha a ΓX vonalon vizsgáljuk a kristályt, akkor nem kell az összes lehetséges szimmetriát figyelembe venni, elég a köbös szimmetria egy úgynevezett kis csoportjával számolni. Ebben az esetben ez a C_{4v} . Ha a Hamilton-operátort sikerül felbontani az irreducibilis reprezentációk segítségével, akkor megkapjuk, hogyan hasadnak fel a pályák. Ehez szükség van a C_{4v} karaktertáblájára (1. táblázat).

	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
R	4	0	0	2	0

2. táblázat. Az adott reprezentáció karakterei

Hogy megtudjuk milyen irreducibilis reprezentációkból áll az adott reprezentáció, ahhoz szükség van az egyes transzformációk mátrixának meghatározásához az adott bázisban (a mostani esetben (5) a bázis).

Az ábrázolás mátrixai a következők lesznek:

$$D(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D(C_4) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad D(C_2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D(\sigma_{v,x}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D(\sigma_{d,1}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

A karakterek meghatározásához csak a konjugált elemosztályok egy-egy elemének mátrixaira van szükségünk, mert egy osztályban lévő transzformációk karaktere megegyezik. Ezek alapján felírható a reprezentáció karaktere ((2. táblázat)):

A csoportelméleti tételek alapján kiszámolható, hogy C_{4v} egyes reprezentációi hányszor szerepelnek a jelenlegi ábrázolásban, hiszen igaz, hogy:

$$\chi(R) = \sum_{i=1}^r a_i \chi^{(i)}(R) \quad (25)$$

Ebből következik, hogy az együttthatókat meg tudjuk határozni.

$$a_\nu = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^r g_i \chi_i^{*(\nu)} \chi_i \quad (26)$$

Az együttthatókra a következőt kapjuk:

$$a_{A_1} = \frac{1}{8} (4 \cdot 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 \cdot 2 + 0 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \cdot 2 + 0 \cdot 1 \cdot 2) = 1 \quad (27)$$

$$a_{A_2} = \frac{1}{8} (4 \cdot 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 \cdot 2 + 0 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot (-1) \cdot 2 + 0 \cdot (-1) \cdot 2) = 0 \quad (28)$$

$$a_{B_1} = \frac{1}{8} (4 \cdot 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) \cdot 2 + 0 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 \cdot 2 + 0 \cdot (-1) \cdot 2) = 1 \quad (29)$$

$$a_{B_2} = \frac{1}{8} (4 \cdot 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) \cdot 2 + 0 \cdot 1 \cdot 1 + 2 \cdot (-1) \cdot 2 + 0 \cdot 1 \cdot 2) = 0 \quad (30)$$

$$a_E = \frac{1}{8} (4 \cdot 2 \cdot 1 + 0 \cdot 0 \cdot 2 + 0 \cdot 2 \cdot 0 + 2 \cdot 1 \cdot 2 + 0 \cdot 0 \cdot 2) = 1 \quad (31)$$

Tehát a reprezentációnk a következő módon bontható fel irreducibilis reprezentációk összegére: $R = A_1 + B_1 + E$, ahol A_1 , és B_1 1D reprezentációk, míg E két dimenziós. Tehát a felhasadás is hasonló lesz, két nem degenerált és egy kétszeresen degenerált pálya lesz.

A sajátállapotok meghatározásához kellenek a csoportelemek mátrixai az adott reprezentációban. Mivel a C_{4v} csoportnak 8 eleme van, ezért szükség van a kimaradt 3 elem mátrixára.

$$D(C_4^{-1}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad D(\sigma_{v,y}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad D(\sigma_{d,2}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

A mátrixok segítségével előállíthatók a projektorok:

$$P_i^\nu = \frac{d_\nu}{|G|} \sum_{R \in G} D_{ii}^{*(\nu)}(R) D(R) \quad (32)$$

Ha elvégezzük a projekciókat, a következőket kapjuk:

$$\varphi^{(A_1)}(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right) \quad (33)$$

$$\varphi^{(B_1)}(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \right) \quad (34)$$

$$\varphi_1^{(E)}(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (35)$$

$$\varphi_2^{(E)}(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}\kappa z} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \quad (36)$$

$$(37)$$

Mivel $\varphi_1^{(E)}(\mathbf{r})$ és $\varphi_2^{(E)}(\mathbf{r})$ egy degenerált altér bázisvektora, ezért a lineáris kombinációjuk is az lesz, így kikeverhető belőlük az előző esetben kapott megoldás. Az irreducibilis reprezentációkra való felbontás segítségével is megkaptuk ugyanazt a eredményt, amit a degenerált perturbációszámításnál.

3. Feladat

Adott egy dimenziós rácsot a következő Hamilton-operátorral írhatunk le:

$$H_{ij}^{\alpha\beta} = \epsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} + \gamma_1 (1 - \delta_{\alpha\beta}) \delta_{ij} + \gamma_2 (\delta_{\alpha A} \delta_{B\beta} \delta_{i,j+1} + \delta_{\alpha B} \delta_{A\beta} \delta_{i+1,j}) \quad (38)$$

Mivel csak első szomszéd kölcsönhatást engedtünk meg, ezért a sajátérték egyenlet a következő egyenletrendszerre vezethető vissza:

$$\varepsilon \varphi_{A,i} - \gamma_1 \varphi_{B,i} - \gamma_2 \varphi_{B,i-1} = 0 \quad (39)$$

$$\varepsilon \varphi_{B,i} - \gamma_1 \varphi_{A,i} - \gamma_2 \varphi_{A,i+1} = 0 \quad (40)$$

Kihasználva a Bloch-tételt, az egyenletrendszer átírható mátrixos alakba.

$$\begin{bmatrix} -\varepsilon & \gamma_1 + \gamma_2 e^{-ika} \\ \gamma_1 + \gamma_2 e^{ika} & -\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{bmatrix} = 0 \quad (41)$$

Megoldva az egyenletet a következőt kapjuk:

$$\varepsilon^2 = (\gamma_1 + \gamma_2 e^{-ika}) (\gamma_1 + \gamma_2 e^{ika}) \quad (42)$$

$$= \gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\gamma_1 \gamma_2 \cos(ka) \quad (43)$$

Ahol a a rácsállandó. A diszperziós reláció két sávot határoz meg:

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\gamma_1 \gamma_2 \cos(ka)} \quad (44)$$

A gap nagyságát meg tudjuk határozni a fentiekből. Ha a $\cos$ argumentuma π , akkor a gyökjel alatti kifejezés minimális: $\varepsilon_{min} = |\gamma_1 - \gamma_2|$. Ebből következik, hogy a gap minimális szélessége $\Delta = 2|\gamma_1 - \gamma_2|$, ami akkor tűnik el, ha a két hopping amplitúdó megegyezik.

4. Feladat

Egy fél végtelen egy dimenziós láncra hasonlóan az előző feladathoz a következő egyenletek írhatók fel:

$$\varepsilon\varphi_{A,i} - \gamma_1\varphi_{B,i} - \gamma_2\varphi_{B,i-1} = 0 \quad (45)$$

$$\varepsilon\varphi_{B,i} - \gamma_1\varphi_{A,i} - \gamma_2\varphi_{A,i+1} = 0 \quad (46)$$

$$\varepsilon\varphi_{B,1} - \gamma_1\varphi_{A,1} - \gamma_2\varphi_{A,2} = 0 \quad (47)$$

$$\varepsilon\varphi_{A,1} - \gamma_1\varphi_{B,1} = 0 \quad (48)$$

A (46) a lánc belsejében, míg (48) a széleken írja le a rendszert. A minta vége miatt kialakulhatnak lokalizált állapotok, miket a következő alakban írhatunk: $\varphi_{\alpha,i} = e^{ika-a\mu}\varphi_{\alpha,i-1}$, ahol $\mu > 0$. A felületi állapotoknak a tiltott sávon belül kell elhelyezkedniük. Az egyenletek megoldása általános esetben csak numerikusan lehetséges, viszont az $\varepsilon = 0$ eset megoldható analitikusan is. Ekkor a fenti egyenletek leegyszerűsödnek.

$$\gamma_1\varphi_{B,i} + \gamma_2\varphi_{B,i-1} = 0 \quad (49)$$

$$\gamma_1\varphi_{A,i} + \gamma_2\varphi_{A,i+1} = 0 \quad (50)$$

$$\gamma_1\varphi_{A,1} + \gamma_2\varphi_{A,2} = 0 \quad (51)$$

$$\gamma_1\varphi_{B,1} = 0 \quad (52)$$

A modellt úgy alakítottuk ki, hogy az A alrács legelső eleme legyen a lánc legszélén, emiatt (50) ból a következő kifejezést kapjuk:

$$\varphi_{A,i+1} = -\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\varphi_{A,i} \quad (53)$$

Összevetve ezt a lokalizált felületi állapotokra felírt összefüggéssel megkapjuk μ lehetséges értékét.

$$|\varphi_{\alpha,i}| = e^{-a\mu}|\varphi_{\alpha,i-1}| \quad (54)$$

$$\left|\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right| = e^{-\mu a} \quad (55)$$

$$\mu = \frac{1}{a} \log \left| \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right| \quad (56)$$

A (53) rekurzív kifejezésből látszik, hogy csak akkor lesznek az állapotok lokalizáltak, ha $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$. Ekkor automatikusan teljesül az a feltétel is, hogy $\mu > 0$. Tehát 0 energiájú felületi állapotok kialakulhatnak, ennek feltétele, hogy a cellán belüli és a cellák közötti hoppingok arányának kiebbnek kell lennie 1-nél.

6.feladat

Egy nem mágneses fém felületi állapotainak effektív Hamilton-operátora a következő módon írható fel:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + b^{mn}k_x^m k_y^n + c_i^{mn}k_x^m k_y^n \sigma_i \quad (57)$$

Ezt az alakot egyszerűbb alakra is hozhatjuk:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + B(\mathbf{k})I_{2 \times 2} + \mathbf{C}(\mathbf{k})\boldsymbol{\sigma} \quad (58)$$

ahol

$$B(\mathbf{k}) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^i b^{i-j,j} k_x^{i-j} k_y^j \quad (59)$$

$$C_\alpha(\mathbf{k}) = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^i c_\alpha^{i-j,j} k_x^{i-j} k_y^j \quad (60)$$

Mivel nem mágneses A Hamilton-operátorunk, ezért az időtükrözésre invariánsnak kell lennie, ez azt jelenti, hogy $B(\mathbf{k}) = B(-\mathbf{k})$ és $\mathbf{C}(\mathbf{k}) = -\mathbf{C}(-\mathbf{k})$. Ezek alapján a következőket (59)-ben és (60)-ban n csak páros lehet és m csak páratlan, a többi esetben el kell tűnnie az együttthatóknak. $B(\mathbf{k})$ és $\mathbf{C}(\mathbf{k})$ a következő módon transzformálódnak egy $g \in G$ csoportelem hatására:

$$B(\mathbf{k}) = B(g\mathbf{k}) \quad (61)$$

$$\mathbf{C}(g\mathbf{k}) = \det(g)g\mathbf{C}(\mathbf{k}) \quad (62)$$

Az effektív Hamilton-operátort harmad rendig vesszük figyelembe, azaz (57)-ben $n + m < 3$, így az előzőek alapján leegyszerűsíthető (59) és (60).

$$B(\mathbf{k}) = b^{20}k_x^2 + b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 \quad (63)$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} c_\alpha^{10}k_x + c_\alpha^{01}k_y \\ c_\beta^{10}k_x + c_\beta^{01}k_y \\ c_\gamma^{10}k_x + c_\gamma^{01}k_y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_\alpha^{30}k_x^3 + c_\alpha^{21}k_x^2k_y + c_\alpha^{12}k_xk_y^2 + c_\alpha^{03}k_y^3 \\ c_\beta^{30}k_x^3 + c_\beta^{21}k_x^2k_y + c_\beta^{12}k_xk_y^2 + c_\beta^{03}k_y^3 \\ c_\gamma^{30}k_x^3 + c_\gamma^{21}k_x^2k_y + c_\gamma^{12}k_xk_y^2 + c_\gamma^{03}k_y^3 \end{bmatrix} \quad (64)$$

C_{2v} és C_{4v} szimmetria esetén tovább egyszerűsödik a két kifejezés. Ehhez meg kell határozni az egyes csoportelemek hatását a $B(\mathbf{k})$ -re és $\mathbf{C}(\mathbf{k})$ -re. Ehhez nem szükséges az össze csoportelemmel végigcsinálni a számolást, elég csak a csoport generátorait megnézni. A C_{2v} generátorai C_2 és σ_v , míg C_{4v} esetében C_4 és σ_v . Ezek mátrix alakban a következők lesznek:

$$D(C_2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D(\sigma_v) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D(C_4) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A $B(\mathbf{k})$ esetében a következő egyenletek lesznek érvényesek C_{2v} C_2 forgatás és tükrözés esetén.

$$C_2 : b^{20}k_x^2 + b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 = b^{20}k_x^2 + b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 \quad (65)$$

$$\sigma_v : b^{20}k_x^2 + b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 = b^{20}k_x^2 - b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 \quad (66)$$

Ebből látszik, hogy b^{11} -nek el kell tűnnie. C_{4v} esetén a következőt kapjuk:

$$C_4 : b^{20}k_x^2 + b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 = b^{20}k_y^2 - b^{11}k_xk_y + b^{02}k_x^2 \quad (67)$$

$$\sigma_v : b^{20}k_x^2 + b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 = b^{20}k_x^2 - b^{11}k_xk_y + b^{02}k_y^2 \quad (68)$$

Ebben az esetben annyi plusz feltételt kell kiszabni, hogy $b^{02} = b^{20}$.

Az elsőrendű tagok C_{2v} esetén:

$$\sigma_v : \begin{bmatrix} -c_\alpha^{10}k_x + c_\alpha^{01}k_y \\ -c_\beta^{10}k_x + c_\beta^{01}k_y \\ -c_\gamma^{10}k_x + c_\gamma^{01}k_y \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} -c_\alpha^{10}k_x - c_\alpha^{01}k_y \\ c_\beta^{10}k_x + c_\beta^{01}k_y \\ c_\gamma^{10}k_x + c_\gamma^{01}k_y \end{bmatrix} \quad (69)$$

$$(70)$$

Ebből azonnal látszik, hogy $c_\alpha^{10} = c_\beta^{01} k_y = c_\gamma^{01} k_y = 0$. A megmaradt komponensekre alkalmazzuk a C_2 -t.

$$C_2 : \begin{bmatrix} -c_\alpha^{01} k_y \\ -c_\beta^{10} k_x \\ -c_\gamma^{10} k_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_\alpha^{10} k_x \\ -c_\beta^{10} k_x \\ c_\gamma^{10} k_x \end{bmatrix} \quad (71)$$

$$(72)$$

Tehát c_γ^{10} is 0 lesz.

C_{4v} esetén a σ_v ugyanúgy hat a vektorokra, mint az előző esetben. Így csak a C_4 hatását kell kiszámolni.

$$C_4 : \begin{bmatrix} -c_\alpha^{01} k_x \\ c_\beta^{10} k_y \\ c_\gamma^{10} k_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_\beta^{10} k_x \\ -c_\alpha^{10} k_y \\ c_\gamma^{10} k_x \end{bmatrix} \quad (73)$$

$$(74)$$

Ezekből következik, hogy $c_\alpha^{01} = -c_\beta^{10}$ és $c_\gamma^{10} k_x = 0$.

A harmadrendű tagok a következőképpen néznek ki:

$$\sigma_v : \begin{bmatrix} -c_\alpha^{30} k_x^3 + c_\alpha^{21} k_x^2 k_y - c_\alpha^{12} k_x k_y^2 + c_\alpha^{03} k_y^3 \\ -c_\beta^{30} k_x^3 + c_\beta^{21} k_x^2 k_y - c_\beta^{12} k_x k_y^2 + c_\beta^{03} k_y^3 \\ -c_\gamma^{30} k_x^3 + c_\gamma^{21} k_x^2 k_y - c_\gamma^{12} k_x k_y^2 + c_\gamma^{03} k_y^3 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} -(c_\alpha^{30} k_x^3 + c_\alpha^{21} k_x^2 k_y + c_\alpha^{12} k_x k_y^2 + c_\alpha^{03} k_y^3) \\ c_\beta^{30} k_x^3 + c_\beta^{21} k_x^2 k_y + c_\beta^{12} k_x k_y^2 + c_\beta^{03} k_y^3 \\ c_\gamma^{30} k_x^3 + c_\gamma^{21} k_x^2 k_y + c_\gamma^{12} k_x k_y^2 + c_\gamma^{03} k_y^3 \end{bmatrix} \quad (75)$$

Leolvasható, hogy $c_\alpha^{30} = c_\alpha^{12} = c_\beta^{21} = c_\beta^{03} = c_\gamma^{21} = c_\gamma^{03} = 0$. A megmaradt elemeken végrehajtjuk a C_2 -t.

$$C_2 : - \begin{bmatrix} c_\alpha^{21} k_x^2 k_y + c_\alpha^{03} k_y^3 \\ c_\beta^{30} k_x^3 + c_\beta^{12} k_x k_y^2 \\ c_\gamma^{30} k_x^3 + c_\gamma^{12} k_x k_y^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c_\alpha^{21} k_x^2 k_y - c_\alpha^{03} k_y^3 \\ -c_\beta^{30} k_x^3 - c_\beta^{12} k_x k_y^2 \\ c_\gamma^{30} k_x^3 + c_\gamma^{12} k_x k_y^2 \end{bmatrix} \quad (76)$$

Az eltűnő elemeke ebben az esetben a c_γ^{30} és a c_γ^{12} . Mivel C_{2v} szimmetriája C_{4v} -nek is, ezért a kapott eredményt felhasználhatjuk C_4 forgatásnál is.

$$C_4 : \begin{bmatrix} -c_\alpha^{21} k_y^2 k_x - c_\alpha^{03} k_x^3 \\ c_\beta^{30} k_y^3 + c_\beta^{12} k_y k_x^2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_\beta^{12} k_y^2 k_x + c_\beta^{30} k_x^3 \\ c_\alpha^{03} k_y^3 + c_\alpha^{21} k_y k_x^2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (77)$$

A fentiekből következik, hogy $c_\beta^{12} = -c_\alpha^{21}$ és $c_\alpha^{30} = -c_\beta^{30}$.

Összefoglalva, a Hamilton-operátorokat az egyszerűsítések után a következő módon írhatjuk fel: C_{2v} esetén:

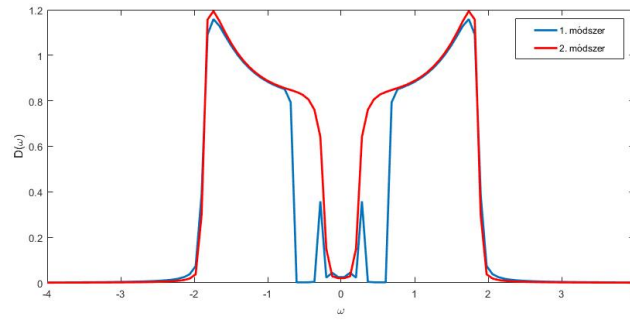
$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + b^{20} k_x^2 + b^{02} k_y^2 I_{2 \times 2} + \begin{bmatrix} c_\alpha^{01} k_y + c_\alpha^{21} k_x^2 k_y + c_\alpha^{03} k_y^3 \\ c_\beta^{10} k_x + c_\beta^{30} k_x^3 + c_\beta^{12} k_x k_y^2 \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \sigma_\alpha \\ \sigma_\beta \\ \sigma_\gamma \end{bmatrix} \quad (78)$$

C_{4v} esetén:

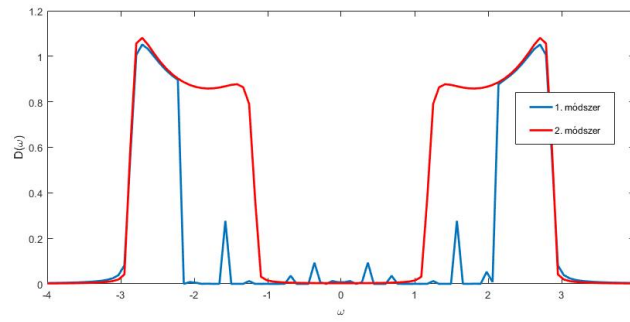
$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + b^{20} (k_x^2 + k_y^2) I_{2 \times 2} + \begin{bmatrix} c_\alpha^{01} k_y + c_\alpha^{21} k_x^2 k_y + c_\alpha^{03} k_y^3 \\ -c_\alpha^{01} k_x - c_\alpha^{03} k_x^3 - c_\alpha^{21} k_x k_y^2 \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \sigma_\alpha \\ \sigma_\beta \\ \sigma_\gamma \end{bmatrix} \quad (79)$$

9.feladat

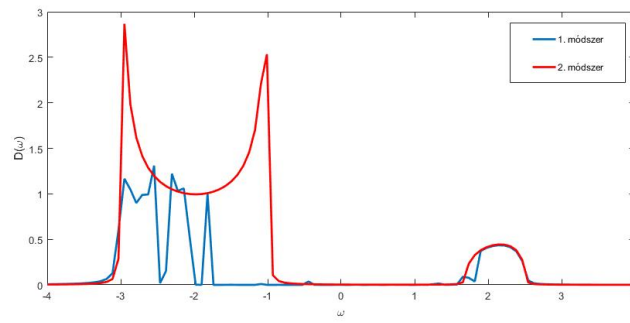
A feladat során egy egysáv tight binding Hamilton-operátort vizsgáltunk kétféle iterációs módszerrel. Mindkét esetben a virtuális kristály közelítést alkalmaztuk. A program futásához két



1. ábra. Állapotsűrűség ω függvényében $c = 0.5$ és $x_0 = 1$ kezdeti értékekkel.



2. ábra. Állapotsűrűség ω függvényében $c = 0.5$ és $x_0 = 2$ kezdeti értékekkel.



3. ábra. Állapotsűrűség ω függvényében $c = 0.1$ és $x_0 = 2$ kezdeti értékekkel.

paramétert kell megadni: c -t és x_0 -t, mivel ezetkből számolja ki a program az első iterációhoz szükséges tagot: $x^1 = (2c - 1)x_0$. A kapott grafikonok a következők különböző kezdeti értékek esetén:

A második iterációs módszer láthatóan jobb eredményeket adott az egyes esetekben. Ennek oka, hogy az iteráció során az első módszer sokkal lassabban konvergál, mint a második, emiatt a pontossága sokkal rosszabb. A kapott grafikonok egy-egy Matlab scripttel készültek.

Az első iterációs módszerhez tartozó Matlab függvény:

```
function [omega, dos]=vca1(x0,c)

omega=linspace(-4,4,100)+1i*0.02;
alpha=0.3;
xin=(2*c-1)*x0*ones(1,length(omega));
dos=zeros(1,length(omega));

for i=1:2000000
    tmp=sqrt((omega-xin).^2-1);
    for i=1:length(tmp)
        if (imag(tmp(i))<0)
            tmp(i)=-(tmp(i));
        end
    end
    xin=alpha*((2*c-1)*x0+(x0*x0-xin.*xin)./tmp)+(1-alpha)*xin;
end
dos=-imag(1./tmp);
```

A második iterációs módszerhez tartozó Matlab függvény:

```
function [omega, dos]=vca2(x0,c)

omega=linspace(-4,4,100)+1i*0.01;
xn=(2*c-1)*x0*ones(1,length(omega));
dos=zeros(1,length(omega));
for i=1:100000
    gz=1./sqrt((omega-xn).^2-1);
    for i=1:length(gz)
        if (imag(1/gz(i))<0)
            gz(i)=-(gz(i));
        end
    end
    tn=c*(x0-xn)./(1-(x0-xn).*gz)-(1-c)*(x0+xn)./(1+(x0+xn).*gz);
    xn=xn+tn./(1+tn.*gz);
end
dos=-imag(gz);

end
```