

Sammanfattning: Fasta tillståndets fysik

Fasta tillståndets fysik är en del av kondenserade materiens fysik. FTF:s del i fysiken är stor – 60% av forskningen

FTF är den vetenskapliga grunden till många tekniska tillämpningar.

- Metaller som ledare av elektricitet
- Halvledare – transistorer, integrerade kretsar, datorer, halvledarlasrar (optoelektronik)
- Magnetism – hårddiskar.

Vetenskapligt

- Man studerar en samling av atomer, N st. där $N \rightarrow \infty$
- ”More is different”; N st. atomer tillsammans uppvisar egenskaper som de ingående atomerna inte har var för sig.
Ex: En kopparatom leder inte ström. Däremot leder en tråd av koppar ström eftersom elektronerna kan flytta sig från en atom till en annan
- Kollektiv effekt

Naturlagar

- Klassisk mekanik: Newtons 2:a lag för atomernas rörelse (atomer är tillräckligt tunga för att det ska vara OK, problem för H och He).
- Kvantmekanik (Schrödingerekvationen) måste användas när vi tittar på elektronens rörelse.
- Statistisk fysik; Planckfördelningen, Fermi-Dirac-fördelningen.

Kap 1: Kristallstrukturer

Kristaller är ordnade samlingar av atomer. De flesta enkla fasta ämnen är ordnade som kristaller, t.ex. Salt (NaCl) eller koppar (Cu), men det finns även oordnade fasta ämnen, s.k. amorfa ämnen, t.ex. glas.

Hur man beskriver en kristallstruktur

Kristall = Gitter + Bas

Gittret (Eng: Lattice) är mönstret som talar om var atomerna ska sitta; ett slags matematiskt begrepp. Basen är innehållet i mönstret, dvs. vilka atomer som är där; ett mer konkret begrepp.

Matematisk beskrivning av gittret

Vi behöver tre primitiva gittervektorer \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 (alla tre får inte ligga i samma plan). Gittret är då alla punkter som kan skrivas:

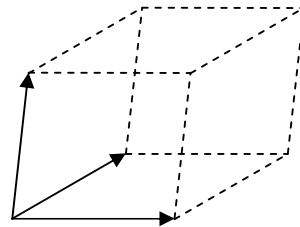
$$\mathbf{R}_i = u_{i1}\mathbf{a}_1 + u_{i2}\mathbf{a}_2 + u_{i3}\mathbf{a}_3$$

där u_{i1} , u_{i2} , u_{i3} är heltal.

Gitter har *translationssymmetri* = en förflyttning med en gittervektor \mathbf{R}_i avbildar gittret på sig självt.

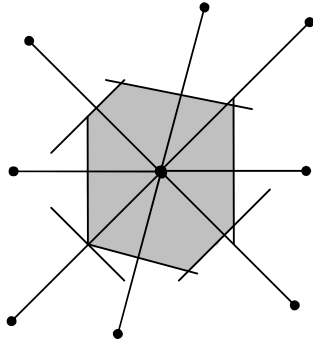
Till varje gitterpunkt hör en *enhetscell*: Det är en parallelepiped med \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 som kanter.

Lådan i figuren t.h. är enhetscellen. Genom att stapla enhetsceller på varandra fyller man hela rummet.



Enhetscellens volym beräknas:

$$\begin{aligned} V &= \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \\ &= \mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \\ &= \mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \end{aligned}$$



Wigner-Seitzcell

Wigner-Seitzcellen är en primitiv enhetscell som ser annorlunda ut – ”territorium” som ligger närmast en viss gitterpunkt. Har samma volym som en primitiv enhetscell.

Bas

Man anger hur många atomer som finns i enhetscellen, vilka atomer det är och var de sitter.

$$\mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a}_1 + y_j\mathbf{a}_2 + z_j\mathbf{a}_3$$

$j = 1, 2, 3, \dots$, antal atomer i basen.

Konventionell cell

Större än enhetscellen, men har enklare form (ger fler atomer i basen) – används ofta för fcc och bcc.

Systematisk klassificering av gitter

Man tittar på vilka symmetrier man har förutom translation

- 7 typer av konventionella celler
- 14 Bravaisgitter

Simple Cubic (sc): En enkelt kubisk enhetscell med primitiv enhetscell som spänns upp av gittervektorerna:

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}; \mathbf{a}_2 = a\hat{y}; \mathbf{a}_3 = a\hat{z}$$

Body Centered Cubic (bcc): En kubisk enhetscell som har en extra gitterpunkt i centrum. Primitiva gittervektorer:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}); \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}); \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

Men här kan även en enkel kub sc väljas som konventionell cell men då fås 2 atomer i varje cell:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= 0 \cdot \mathbf{a}_1 + 0 \cdot \mathbf{a}_2 + 0 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 \end{aligned}$$

Face Centered Cubic (fcc): En kubisk enhetscell som har en gitterpunkt i centrum av varje kubsida. Med sc som konventionell cell får man 4 atomer per konventionell cell:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= 0 + 0 + 0; \mathbf{r}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 + 0\mathbf{a}_3 \\ \mathbf{r}_3 &= 0\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3; \mathbf{r}_4 = \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 \end{aligned}$$

fcc kan dessutom ses som en stapel av tätpackade plan.

Hexagonal Close Packed Structure (hcp): Ett hexagonalt gitter som kräver att man har 2 atomer i basen. Samma *packing fraction* som fcc.

Diamant: kan ses som en fcc med två-atomig bas.

Zinkblend: Diamant fast där ”svart och vit” är olika atomer, t.ex. GaAs.

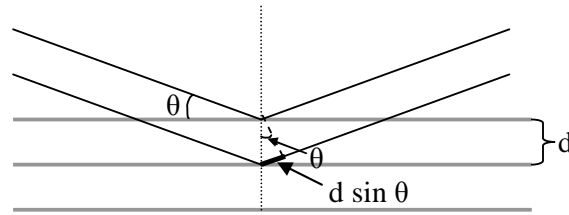
Kap 2: Diffraction och reciproka gitter

För att kunna bestämma strukturer hos olika kristaller måste man göra experiment. Man låter en våg spridas mot kristallen. Genom att studera interferenseffekter kan strukturer och atomavstånd bestämmas.

Våglängden måste vara jämförbar med atomavståndet [\AA] \rightarrow Röntgen eller elektroner.

Braggs lag

Betrakta en kristall som en stapel av svagt reflekterande plan.



Den extra vägen som den undre strålen måste färdas innebär att kravet för konstruktiv interferens blir:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Trots att härledningen är så enkel är Braggs lag allmängiltig, men vissa problem kan uppstå:

- i. Många uppsättningar plan
- ii. Hur stark signal får man?

För att så småningom kunna konstruera en mer fullständig teori inför vi begreppet *reciprort gitter*.

Reciprort gitter

= "alla vågvektorer som beskriver planvågor med samma periodicitet som det ursprungliga gittret".

En planvåg skrivs: $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$, där \vec{k} = vågvektor; $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ [m⁻¹].

Cellperiodicitet betyder matematiskt

$$e^{i\vec{G}(\vec{r}+\vec{r}_0)} = e^{i\vec{G}\vec{r}_0}$$

För att detta skall gälla måste $e^{i\vec{G}\vec{r}_0} = 1 \Rightarrow \vec{G}\vec{r}_0 = n2\pi$ vars lösningar gör att även \vec{G} bildar ett gitter.

$$\vec{G} = v_1\mathbf{b}_1 + v_2\mathbf{b}_2 + v_3\mathbf{b}_3$$

Där \mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3 är primitiva gittervektorer.

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

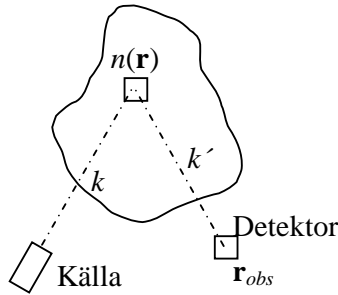
Allmänt gäller:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} ; \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)} ; \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

Obs! Nämnarna är enhetscellens volym som är densamma för alla termer.

Spridning av röntgenstrålning

(allmän behandling)



Energikonservering kräver att $h\omega = hc|k| = hc|k'| = h\omega'$. Det är elektronerna i kristallen som oscillerar och sprider röntgen. Elektronerna är ojämnt fördelade i rummet (de flesta finns nära atomkärnorna) och detta ger konstruktiv interferens för vissa k och destruktiv interferens för andra.

Inkommande vågens amplitud: $e^{ik \cdot r}$. Elektronsvängning i \mathbf{r} : $n(\mathbf{r}) \cdot e^{ik \cdot r}$. Fäsförskjutning mellan \mathbf{r} och \mathbf{r}_{obs} : $e^{ik' \cdot (\mathbf{r}_{obs} - \mathbf{r})}$.

Totalt detekterad amplitud (hela kristallen):

$$F = \int n(\mathbf{r}) e^{ik \cdot r} e^{ik' \cdot (\mathbf{r}_{obs} - \mathbf{r})} d^3 r$$

$$= e^{ik' \cdot \mathbf{r}_{obs}} \int_{kristall} n(\mathbf{r}) e^{i(k - k') \cdot r} d^3 r$$

Låt $\Delta k = k' - k = \hat{k}$ = ändring av vågvektor.

Integralen kan delas upp i småbitar, en för varje enhetscell och i varje enhetscell har vi $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i + \mathbf{s}$

Alltså blir

$$F = e^{ik' \cdot \mathbf{r}_{obs}} \sum_i \int_{cell} n(\mathbf{r}) e^{-i\Delta k \cdot (\mathbf{R}_i + \mathbf{s})} d^3 r$$

men eftersom n är periodisk gäller att $n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{R}_i + \mathbf{s}) = n(\mathbf{s})$, så att

$$F = e^{ik' \cdot \mathbf{r}_{obs}} \cdot \sum_j e^{-i\Delta k \cdot \mathbf{R}_j} \int_{cell} n(\mathbf{s}) e^{-i\Delta k \cdot \mathbf{s}} d^3 s$$

Där första faktorn bara är en fas, andra faktorn är en summa över gitterpunkter och sista faktorn är en integral över en godtycklig cell i kristallen.

För godtyckligt Δk blir summan över gitterpunkter i stort sett 0, men om $\Delta k = G$ blir den istället $\sum_j e^{-iG \cdot \mathbf{R}_j} = \sum_j 1 = N = \text{antal celler}$. Alltså kräver konstruktiv interferens (stora värden på F) att

$$\Delta k = k' - k = G \Leftrightarrow k' = k + G$$

Strukturfaktorn

Sista faktorn i amplituden ovan kallas *strukturfaktorn* som alltså är

$$S_{\mathbf{G}} = \int_{\text{cell}} n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r$$

Ofta kan tätheten n delas upp som en summa av atomära elektrontätheter:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_j n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$$

vilket tillslut ger att

$$S_{\mathbf{G}} = \sum_j e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_j} \cdot f_j(\mathbf{G})$$

Strukturfaktorn ”släcker” de punkter i konventionella reciproka cellen som inte finns med i den primitiva cellen. Detta gör att oavsett val av enhetscell så återfås samma fysikaliska resultat.

Definition: *Brillouin-zon* är en Wigner-Seitzcell i reciproka rummet.

Kap 6: Frielektronmodellen

Fasta ämnens elektronstruktur; Fast ämne = atomer = atomkärnor + elektroner. Av alla fasta ämnen har alkalimetallerna den enklaste elektronstrukturen.

Kärna + hårt bundna elektroner ger en cellperiodisk potential som de yttersta elektronerna måste röra sig i.

Frielektronmodellen

Sätt potentialen $V = \text{konstant} = 0$ för de löst bundna elektronerna. Schrödingerekvationen kommer då att ha planvågslösningar på formen

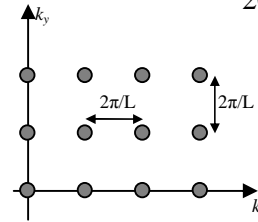
$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

Där V är kristallvolymen. Och energin: $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}$.

Vi måste ha vågfunktioner som för olika k är ortogonala mot varandra, dvs. k -vektorerna kan inte ligga hur tätt som helst. Periodiska randvillkor på en stor kub med sidan L fixar detta.

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L)$$

Periodiska randvillkor uppfylls av $\vec{k} = (n_1 \frac{2\pi}{L}, n_2 \frac{2\pi}{L}, n_3 \frac{2\pi}{L})$.



Tillståndstätheten i k -rummet:

$$D(k) = \frac{1 \text{ tillstånd}}{\text{kub}} = \frac{1 \text{ tillstånd}}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3}{8\pi^3} = \frac{V}{8\pi^3}$$

Elektroner är fermioner; det finns bara plats för en spinn-upp och en spinn-ner elektron per k -punkt.

Med $T = 0$ K är elektronsystemet som helhet i grundtillståndet. Fyll de orbitaler som ger lägst energi. De ligger inuti en sfär med centrum i $k = 0$.

Definition: $k_F = \text{Fermivåvektorn} = \text{sfärens radie}$.

Hur stor är k_F ?

Vi behöver N tillstånd inuti. P.g.a. grundtillståndet måste antal elektroner = antal tillstånd.

$$N = 2D(k) \frac{4\pi k_F^3}{3} = 2 \frac{V}{8\pi^3} \cdot \frac{4\pi k_F^3}{3}$$

\Leftrightarrow

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$$

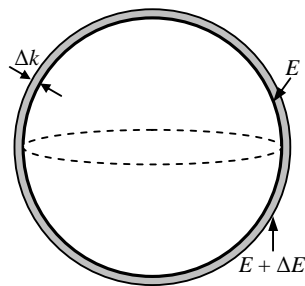
Där $n = N/V = \text{elektronkoncentration}$.

Motsvarande energi (största energin för en elektron i grundtillståndet) kallas *Fermienergin*:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

För typiska metaller är $E_F \approx 5 - 10$ eV.

Tillståndstäthet i energirummet



Det mörkare området är antalet tillstånd med energi mellan E och $E + \Delta E$.

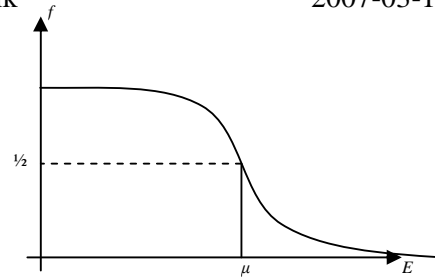
Antalet tillstånd är då: $2D(k)4\pi k^2 \Delta k = D(E)\Delta E$.

$$\Rightarrow D(E) = 2 \frac{4\pi k^2 D(k)}{\frac{\Delta E}{\Delta k}} = \left\{ \begin{array}{l} \Delta E, \Delta k \rightarrow 0 \\ \Rightarrow \frac{\Delta E}{\Delta k} \rightarrow \frac{dE}{dk} \end{array} \right\} = \dots = \frac{3}{2} N \frac{\sqrt{E}}{E_F^{3/2}}$$

Ändlig temperatur

Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

där μ är kemiska potentialen.

Det måste finnas lika många "hål" som exciterade elektroner, dvs. totala antalet elektroner måste bevaras.

För ett slutet system av fermioner ställer μ in sig så att väntevärdet av totala antalet partiklar är riktigt, alltså N .

För $T \ll T_F = E_F/k_B$ är $\mu \approx E_F$.

Värmekapacitet

Vi skall beräkna C_V för elektronsystemet. För detta måste vi veta totala energin:

$$U = \int_0^{\infty} E \cdot D(E) \cdot f(E) dE$$

eftersom

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^{\infty} E \cdot D(E) \frac{df}{dT} dE$$

Approximationer:

- $\frac{df}{dT} \neq 0$ endast nära E_F
- $\mu = E_F$
- $D(E) \approx D(E_F)$ nära E_F

Detta gör att man får *värmekapaciteten* till:

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) \cdot k_B^2 T =: \gamma T$$

vilket alltså beror linjärt på T .

Resultatet är mer generellt än härledningen.

- Oberoende av att elektronerna är fria
- Oberoende av antalet dimensioner
- C_V litet jämförbart med i en ideal gas där $C_V = \frac{3}{2} N k_B$.

Elektrontransport

Fria elektroner kan röra sig och därför transportera elektricitet. Vi vill ha ett samband mellan elektriskt fält \mathbf{E} och strömtäthet j . Rörelseekvation för en elektron: $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$ och $\mathbf{F} = (-e)\mathbf{E}$.

Rörelsemängden uttrycks $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \Rightarrow \hbar \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = -e\mathbf{E}$.

Men impulsen och vågvektorn kan inte ändras hur länge som helst. Efter en tid träffar elektronerna på orenheter etc. och bromsas.

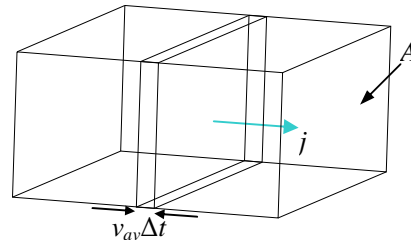
Definition: $\tau = \text{relaxationstid}$ = tid mellan kollisioner.

Kollisionerna ger ett slags friktion. Rörelseekvationen för genomsnittsimpulsen:

$$\frac{\partial \mathbf{p}_{av}}{\partial t} = -e\mathbf{E} - \frac{1}{\tau} \mathbf{p}_{av} \text{ och vi söker stationärtillstånd, dvs. då } \frac{\partial \mathbf{p}_{av}}{\partial t} = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{p}_{av} = -e\mathbf{E}\tau$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{v}_{av} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m}$$



Alla elektroner i en volym, $V = A|v_{av}|\Delta t$ passerar en tvärsnittsytta under tiden Δt .

Strömmen är enligt definition: $I = \frac{\text{laddning}}{\Delta t} = \frac{(-e) \cdot n \cdot A \cdot v_{av} \cdot \Delta t}{\Delta t} = -e \cdot n \cdot v_{av} \cdot A$, där som vanligt n är elektronkoncentrationen. Strömtäthet i 3 dimensioner är per definition:

$$j = \frac{I}{A} = -e \cdot n \cdot v_{av} = -e \cdot n \cdot \left(\frac{-e\mathbf{E}}{m} \tau \right)$$

och vi får tillslut att

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} =: \sigma \mathbf{E}$$

σ kallas *ledningsförmåga* och är en materialegenskap. Stor elektronkoncentration, n , innebär många elektroner \rightarrow ger bra ledningsförmåga. Stor relaxationstid, τ , ger också bra ledningsförmåga.

Ohms lag

Ledningsförmågans reciprok är *resistivitet* $\rho = \frac{1}{\sigma}$.

Tittar vi på strömmen $I = j \cdot A = \sigma A |E| = \sigma A \frac{U}{l}$. Detta gör att spänningen blir

$$U = \frac{l\rho}{A} I = R \cdot I \text{ som alltså är Ohms lag.}$$

Magnetotransport

Vad händer med ett magnetfält på plats?

$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ som med ett magnetfält längs z-axeln,

$\mathbf{B} = B\hat{z}$ och ström som bara går i x-y-planet, $\mathbf{v} = v_x\hat{x} + v_y\hat{y}$,

blir termerna t.h. om man utvecklar sambanden komponentvis med Newtons andra lag.

Stationärtillstånd eftersöks (konstant drifhastighet). Detta ger så småningom en matrisekvation:

$$m \left(\frac{dv_x}{dt} + \frac{1}{\tau} v_x \right) = -eE_x - ev_y B$$

$$m \left(\frac{dv_y}{dt} + \frac{1}{\tau} v_y \right) = -eE_y - ev_x B$$

$$m \left(\frac{dv_z}{dt} + \frac{1}{\tau} v_z \right) = -eE_z$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = \frac{-e\tau}{m} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix}$$

Där $\omega_c = \frac{eB}{m}$ = cyklotronfrekvens.

Halleffekten

Anta att en konstant ström flyter längs x-axeln. \rightarrow Drifhastigheterna $v_y = v_z = 0$.

Om vi nu tittar på andra raden i matrisekvationen ser vi att det krävs ett elektriskt fält i y-riktningen för att balansera Lorentzkraften:

$$E_y = \frac{m\omega_c}{e} v_x = Bv_x$$

Vi får en *hallspänning* som kan mätas.

$$\text{Hallkoefficienten beräknas } R_H = \frac{E_y}{j_x B} = \{F.E.M.\} = \frac{E_y}{-n \cdot e \cdot v_x \cdot B} = \frac{B \cdot v_x}{-n \cdot e \cdot v_x \cdot B} = -\frac{1}{ne}$$

Den beror alltså bara på elektrontätheten. Men koefficienten har härletts med F.E.M!

Kap 7: Bandstruktur

Istället för en konstant potential som i Frielektronmodellen (F.E.M.) betraktar vi nu en *periodisk potential*. Detta medföljer att elektronerna inte kan ha alla möjliga energier längre vilket skapar *bandgap*. Denna teori kan dessutom förklara skillnaden mellan metall och isolator.

En periodisk potential kan beskrivas $V(\vec{r} + \vec{R}_i) = V(\vec{r})$ för alla gittervektorer \vec{R}_i . Tack vare periodiciteten utvecklas den som en fourierserie:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

Om vi nu ska försöka lösa Schrödingers ekvation med en planvågsansats (bra gissning om V är liten så att elektronerna nästan är fria)

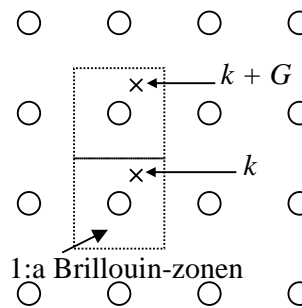
$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

som med ansatsen $\psi(\vec{r}) = N \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ blir

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(\vec{r}) \quad (\text{samma planvåg})$$

och

$$V\psi = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} N e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = N \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}$$



Vi har alltså diffraktion av elektronvågor. Om vi hade haft en ansats med alla planvågor som $V\psi$ producerar så är vi på god väg att lösa problemet. Med ansatsen $\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}$

(där $C_{\vec{G}}$ är det okända som ska bestämmas) kommer $V\psi$ att innehålla exakt samma planvågor och vi kan skriva:

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Detta kallas ett *Bloch-tillstånd* och $u_{\vec{k}}$ är cellperiodisk. Notera att även elektrontätheten

$$|\psi(\vec{r})|^2 = |u_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 \quad \text{är periodisk.}$$

- k ligger i 1:a Brillouin-zonen, men för givet k finns det många lösningar (med olika energier och olika kombinationer av $C_{\vec{G}}$).
- Även en konstant potential är periodisk \rightarrow Frielektron-tillstånd är Bloch-tillstånd.

Hur många tillstånd finns det i varje band?

Vi tillämpar periodiska randvillkor på ett kubiskt prov. $\psi_k^{(n)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}}^{(n)} \cdot e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$ och

$$\psi_k^{(n)}(\vec{r}) = \psi_k^{(n)}(\vec{r} + L\hat{x}) \quad (\text{samma i y- och z-led}), \quad \text{där } n \text{ är bandindex.}$$

Detta ger k som på sidan 7 och $n_1 n_2 n_3$ är heltal valda sådana att k ligger i 1:a BZ. Tillståndstätheten i k -rummet är som på sidan 7 vilket ger att totala antalet tillstånd i ett band blir:

$$D(k) \cdot V_{BZ} = \frac{V}{8\pi^3} \cdot \frac{8\pi^3}{V_{cell}} = \frac{L^3}{a^3} = N_{cell} = \text{antal enhetsceller}$$

Om vi räknar har vi $2N_{cell}$ tillstånd per band \rightarrow 2 tillstånd/cell. För att fylla ett band behövs 2 elektroner från varje enhetscell (atom).

Bandstruktur och ledningsförmåga

Hur förändras elektronrörelsen av en periodisk potential? – Sammanfattningsvis bidrar endast delvis fyllda band till ledningsförmågan. – Tomma och helt fyllda band kan inte bidra!

1. En elektron i ett Blochtillstånd, ψ_k är k ligger i första BZ har kristallimpuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ och som förut gäller Newtons andra lag: $\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\hbar \mathbf{k}) = \mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ (\mathbf{p} måste ses som ett tvärsnitt).
2. Ett tidsberoende elektriskt fält kan inte flytta (excitera) en elektron från ett band till ett annat. (men ljus – med hög frekvens – kan)
3. Tillstånd med vågvektor k och $k + G$ i samma band är identiska
4. Elektronens hastighet ges av $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E_k}{\partial k_x}, \frac{\partial E_k}{\partial k_y}, \frac{\partial E_k}{\partial k_z} \right)$ = elektronens grupphastighet.

Kap 8: Halvledare

Vid $T = 0$ K är halvledare isolatorer.

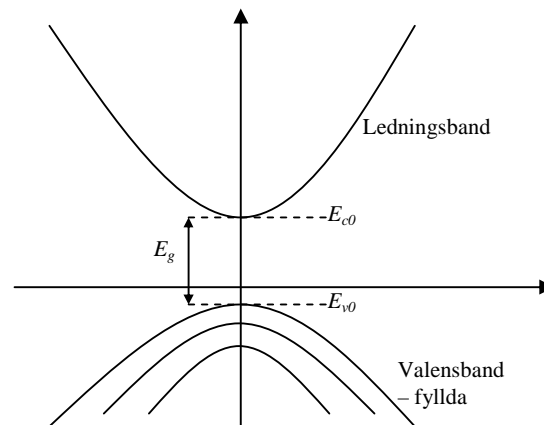
Typisk bandstruktur: Direkt bandgap i t.ex. GaAs vilket gör att den kan användas i optiska komponenter.

Låt m_c^* beteckna den *effektiva massan* i ledningsbandet.

Små bandgap i halvledare (mindre än isolator) \rightarrow små effektivmassor.

I en halvledare kan elektrisk transport ske tack vare att en del tillstånd i ledningsbandet fylls, eller genom att en del tillstånd i valensbandet töms. I båda fall är det elektroner som står för laddningstransporter.

För bokföringsändamål kan det dock vara bra att inför begreppet *hål* – alltså frånvaron av elektroner i valensbandet. Eftersom vi har många elektroner men få hål i valensbandet innebär detta sätt en förenkling.



Hål

Egenskaperna hos hål är som följer:

- Vågvektor: $\frac{1}{k_{\text{hål}}} = -\frac{1}{k_e}$
- Energi: $E_{\text{hål}}(\frac{1}{k_{\text{hål}}}) = -E_e(\frac{1}{k_e})$
- Laddning: $q_{\text{hål}} = +e = -q_e$
- Hastighet: $\mathbf{v}_{\text{hål}} = \nabla_{k_{\text{hål}}} E_{\text{hål}} = \mathbf{v}_e$
- Effektiv massa: $m_{\text{hål}} = -m_v^*$

Laddningskoncentration

De laddningsbärare som finns i en halvledare är resultatet av *termisk excitation* och *dopning*. Föroreningar kan *donera* elektroner till ledningsbandet eller fungera som *acceptor* av elektroner från valensbandet.

Dopning är enda sättet att skapa tekniskt användbara halvledare, men vår analys börjar med det enklare odopade fallet, en s.k. *intrinsisk halvledare* som bara har termiskt exciterade hål och elektroner.

För att härleda laddningskoncentrationen måste vi först titta på några approximationer:

Fermi-Diracfördelningen blir $f(E) \approx e^{-(E-\mu)/k_B T}$ i ledningsbandet och $f(E) \approx 1 - e^{-(\mu-E)/k_B T}$ i valensbandet, eftersom μ antas ligga på behörigt avstånd från bandkanterna.

Tillståndstätheterna (angivet i tillståndstäthet per volym) i respektive band blir

$$\ddot{e}_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_{c0}} ; \ddot{e}_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_{v0} - E}$$

Så elektronkoncentrationen i ledningsbandet blir:

$$n_c(T) \approx \int_{E_{c0}}^{\infty} \ddot{e}_c(E) \cdot f(E) dE = \frac{1}{4} \left(\frac{2m_c k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_{c0}-\mu)/k_B T} \text{ och på samma sätt blir koncentrationen}$$

av hål i valensbandet: $p_v(T) \approx \frac{1}{4} \left(\frac{2m_v k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(\mu-E_{v0})/k_B T}$. Kemiska potentialen är fortfarande

okänd, men antal hål i valensbandet måste vara lika många som antal elektroner i ledningsbandet, alltså

$$n_c = p_v = \sqrt{n_c^2} = \sqrt{n_c p_v} = c_{\text{int}} = \text{intrinsisk koncentration}$$

och vi får

$$c_{\text{int}} = \frac{1}{4} \left(\frac{2k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T},$$

där $E_g = E_{c0} - E_{v0}$ = bandgapet.

Vi kan nu beräkna kemiska potentialen som blir $\mu = \mu_{\text{int}} = \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_v}{m_c} \right) + \frac{E_{c0} + E_{v0}}{2}$.

Dopning

Om en grupp V atom placeras i Si (grupp IV) har vi en atom som dels har en extra plusladdning i kärnan dels en extra elektron. Fyra valenselektroner (från föreningen) hamnar i valensbandet och deltar i den kovalenta bindningen. Extra elektronen får inte plats i valensbandet utan måste placeras i ledningsbandet. Men den känner av attraktionen från plusladdningen och stannar därför (vid $T = 0$) i ett bundet tillstånd i närheten av grupp IV-atomen.

Kvantmekaniskt liknar det bundna tillståndet ett vätetillstånd. Radien är mycket stor och bindningsenergin liten eftersom m_c är liten, dessutom har halvledare hög dielektricitetskonstant som skärmar växelverkan.

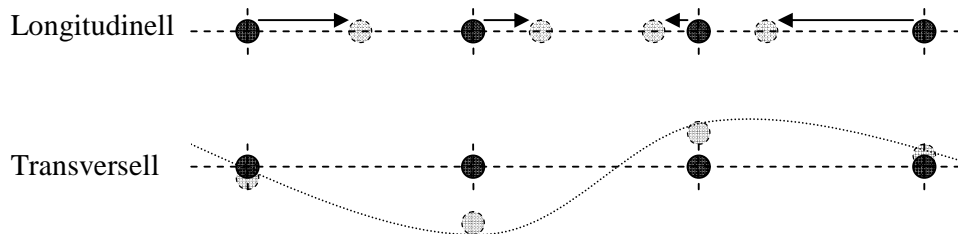
Dopningen gör förstås nytta först när elektronen i det bundna tillståndet exciteras till ledningsbandet, men det är lätt att göra vid rumstemperatur eftersom det finns oerhört många fler tillstånd i ledningsbandet. $\rightarrow n_c \approx$ donatorkoncentration.

Kap 4: Kristallvibrationer

Hittills har vi antagit att atomerna i en kristall är fast fixerade. I själva verket kan atomerna vibrera kring sina jämviktslägen i en kristall. Detta ger upphov till bl.a. ljudvågors propagation och ger elastiska egenskaper även hos fasta material.

Återigen används en periodisk potential, vilket ger energiminimum. Om en atom rubbas från sitt jämviktsläge ökar energin och en återförande kraft (proportionell mot förflyttningen) uppstår. Atom-atomväxelverkan medför gittervibrationer.

Vi får två typer av vågor som fortplantas i kristallen:



Gittervibration

Vi betraktar en 1-dimensionell modell

$$x_j(t) = R_j + u_j(t) = a \cdot j + u_j(t)$$

The diagram shows a 1D lattice model with atoms at positions R_{j-1} , R_j , and R_{j+1} . A spring with constant C connects the atoms. The lattice constant is a , and the displacement of the atom at R_j is u_j .

Vi har krafter som verkar mellan atomerna. Om man försöker trycka ihop två atomer till ett avstånd som är mindre än a , måste många elektroner rymmas på liten plats – Pauliprincipen tvingar en del av dem till högre energitillstånd. I motsatta fallet (när en bindning sträcks) ökar också energin eftersom elektronernas potentiella energi ökar. I modellen beskrivs detta med fjädrar enligt klassisk mekanik: $F_{\text{fjäderkraft}} = \text{fjäderkonstant} * \text{förlängning}$.

I detta fall får vi att alla krafter på atom j (alltså krafterna från atom $j + 1$ och $j - 1$) blir:

$$F_{j,j+1} = C(x_{j+1} - x_j - a) = C(u_{j+1} - u_j)$$

$$F_{j,j-1} = C(x_{j-1} - x_j - a) = C(u_{j-1} - u_j)$$

$$\Rightarrow F_j = F_{j,j-1} + F_{j,j+1} = C(u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j)$$

Newtons andra lag säger att $F_j = M \frac{d^2 x_j}{dt^2} = M \frac{d^2 u_j}{dt^2}$ som alltså gäller för alla j och som dessutom är kopplade till varandra. En planvågslösning ansätts: $u_j(t) = u_k e^{ikR_j} e^{-i\omega_k t}$ där u_k är vågens amplitud, andra faktorn är en planvåg och sista faktorn är en harmonisk svängning.

Eftersom det bara är den reella delen av funktionen som kommer ge utslag i verkligheten kommer vi kunna förenkla en hel del och man får tillslut att

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \sin \frac{ka}{2}$$

Tvåatomig bas

Vi kommer behöva två olika utslagsamplituder u_j och v_j för de olika atomerna med massor M_1 och M_2 .

Rörelseekvationerna $M_1 \frac{d^2 u_j}{dt^2} = C(v_j + v_{j-1} - 2u_j)$ och $M_2 \frac{d^2 v_j}{dt^2} = C(u_j + u_{j-1} - 2v_j)$ blir med liknande planvågsansatser som ovan efter förenkling till en matrisekvation:

$$\begin{bmatrix} 2C - M_1 \omega_k^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - M_2 \omega_k^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

som har icke-triviala lösningar om $\begin{vmatrix} 2C - M_1 \omega_k^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - M_2 \omega_k^2 \end{vmatrix} = 0$

$$\Leftrightarrow M_1 M_2 \omega_k^4 - 2C(M_1 + M_2) \omega_k^2 + 2C(1 - \cos ka) = 0$$

Det finns sedan tre gränsvärden då $ka \rightarrow 0$ och vid BZ-gränsen $ka = \pm\pi$.

$$\begin{aligned} ka \rightarrow 0 & & \omega_k^2 &\cong 2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (\text{optiska grenen}) \\ \omega_k^2 &\cong \frac{\frac{1}{2}C}{M_1 + M_2} k^2 a^2 \quad (\text{akustiska grenen}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} ka = \pm\pi & & \omega_k^2 &= \frac{2C}{M_1} \\ & & \omega_k^2 &= \frac{2C}{M_2} \end{aligned}$$

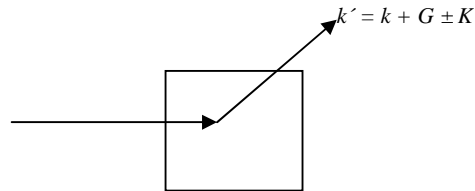
Experiment

Optiska fononer kallas så eftersom de kan exciteras av ljus.

Dispersionsrelationer kan mätas med spridningsexperiment (neutroner vanligast). Med energier på ~ 25 meV kommer vågvektorn för neutronerna att ha samma storleksordning som

reciproka gittervektorerna (se Braggvillkor). $k = \frac{\sqrt{2mE}}{h} \approx 3,5 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$.

Skulle kristallen vara statisk får man $k' = k + G$, men eftersom det finns vibrationer i materialet som ger inelastiska spridningar kommer en extra vågvektor att kunna mätas upp, nämligen vibrationens vågvektor K (genom att mäta energin $E_{k'} = E_k \pm \hbar\omega_K$).



Kap 5: Termiska egenskaper

När man värmer en kristall lagras den tillförda energin i första hand som gittervibrationer (fononer). Kom ihåg $C_V = 3N \cdot k_B$. Vi ska utreda värmekapaciteten $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \equiv C_p$ (för fasta ämnen).

Värmekapacitet för akustiska fononer

Totala energin U är en summa av harmoniska oscillationsenergier. Varje vibrationsmod fungerar kvantmekaniskt som en harmonisk oscillator: ω_k är frekvens och $\hbar\omega_k$ är energikvantat (fononenergin) och u_k är oscillatorns utslag.

Inre energin blir genomsnittsennergien för en mod summerat över alla moder:

$$U = \sum_{k,v} \left(\langle n_{kv} \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{kv}$$

Där $\langle n_{kv} \rangle =$ väntevärdet för antalet fononer $= \frac{1}{e^{\hbar\omega_{kv}/k_B T} - 1} =$ Planckfördelningen.

För att räkna moder skriver vi om ena summan till en integral, genom att titta på tillståndstätheten i k -rummet:

$$U = \sum_v \int D(k) \left(\langle n_{kv} \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{kv} d^3k = \sum_v \int D_v(\omega) \left(\langle n_{\omega} \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega d\omega$$

Vi vet att $D(k)\Delta k = D(\omega)\Delta\omega$, men sambandet mellan $D(k)$ och $D_v(\omega)$ är ofta komplicerat. Vi tittar därför på *Debye-modellen* för akustiska fononer. Denna modell medför vissa approximationer:

- Dispersionsrelationen $\rightarrow \omega_k \approx v_v |k|$
- Brillouin-zonen omformas till en sfär med samma volym, där radien på sfären är

$$\frac{4\pi k_D^3}{3} = V_{BZ} = \frac{8\pi}{V} N_{cell}$$

Debye-vågvektorn \rightarrow

$$\Leftrightarrow k_D = \left(\frac{6\pi^2 N_{cell}}{V} \right)^{1/3}$$

Dessa två approximationer slås samman och gör att $\omega_D = v_v k_D = \left(\frac{6\pi^2 N_{cell} v_v^3}{V} \right)^{1/3}$.

Sfär-approximationen kommer till användning än en gång då vi utreder

$$D_v(\omega)\Delta\omega = D(k)\Delta k = 4\pi k^2 \Delta k D(k)$$

$$\Rightarrow D_v(\omega) = \frac{4\pi k^2 D(k)}{\frac{\Delta\omega}{\Delta k}} = \left\{ \begin{array}{l} \Delta k, \Delta\omega \rightarrow 0 \\ \Rightarrow \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \rightarrow \frac{d\omega}{dk} \end{array} \right\} = \dots = D_v(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_v^3}$$

Insatt i C_V ovan ger så småningom två lösningar beroende på T :

- Litet $T \rightarrow$ övre integralgräns går mot ∞ och vi får:

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} N_{cell} k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \quad \text{Debyes } T^3\text{-lag.}$$

$$\theta_D \text{ är Debye-temperaturen ; } \theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$$

- Vid stora temperaturer får vi tillbaka $C_V = 3N_{cell}k_B$.

Som synes gäller *ekvipartitionsprincipen* fortfarande, $\frac{1}{2}k_B T$ kinetisk energi per partikel och riktning + $\frac{1}{2}k_B T$ potentiell energi per partikel och riktning.

Värmekapacitet för optiska fononer

För detta används *Einstein-modellen*. Vi ersätter den optiska grenen med en rät linje. På linjen ska det finnas $3N_{cell}(p-1)$ optiska moder som har samma frekvens $\omega_E =$ Einstein-frekvensen.

$$\Rightarrow U = 2N_{cell}(p-1)\hbar\omega_E \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right)$$

och som vanligt

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \begin{cases} 3N_{cell}(p-1)k_B & \text{(stort } T) \\ 3N_{cell}(p-1)k_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 e^{-\hbar\omega_E/k_B T} & \text{(litet } T) \end{cases}$$

Slutord

Detta häfte är en sammanställning av personliga föreläsninganteckningar från kursen *Fasta tillståndets fysik*, 5p som gavs vårterminen 2006 på Örebro universitet. Härledningarna är ibland förkortade versioner av de som visades av vår föreläsare Peter Johansson, men är förhoppningsvis tillräckligt fullständiga för att bilda sig en uppfattning om hur det ska gå till.

Jag vill rikta ett stort tack till mina kurskompisar, men framförallt till Michael Kempf som tappert har slitit med inlämningsuppgifter tillsammans med mig – vissa gånger timtals utan att vi ens kommit fram till någonting. Trots detta har vi nu klarat av kursen och förståelsen har äntligen infunnit sig.

Till dig som läser eller tänker läsa denna kurs eller en liknande, vill jag bara säga: Kämpa på! Du kommer att förstå det mesta till slut. Det kan vara lite motigt i början med alla definitioner och väldigt formella termer, men de sätter sig så småningom och även du kommer förstå de begrepp som tas upp i detta häfte.

Fredrik Fogelqvist, fysikstudent
Örebro 2006-03-16

