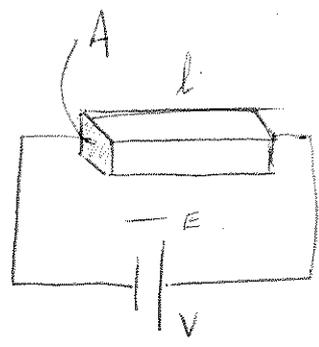


20/1-14

Fasta



$$R = \rho \frac{l}{A}$$

ρ [Ωm]

$E=0$

$$E_{\text{term}} = \frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} m v_{\text{term}}^2$$

$E>0$

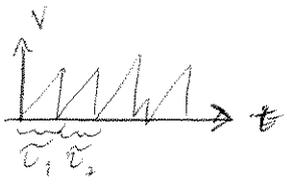
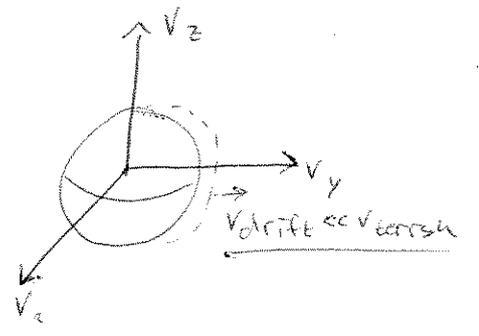
$$F = qE = ma \Rightarrow a = \frac{qE}{m}$$

Definera

$$v_{\text{drift}} = a \langle \tau \rangle = \frac{qE}{m} \langle \tau \rangle =$$

$$= \mu E$$

↑
elektronens
mobilitet



Ohm

$$V = RI, \quad E = \frac{V}{l} = \frac{I}{\sigma A}$$

$$J = q \cdot n \cdot v_{\text{DRIFT}} = q \cdot n \cdot \mu \cdot E = \sigma E$$

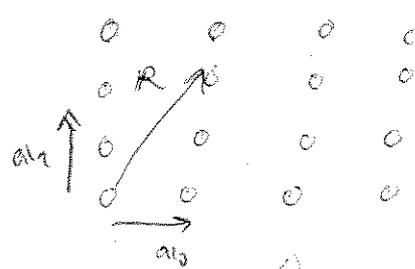
↑
konc. av
ledningse⁻

↑
konduktivitet

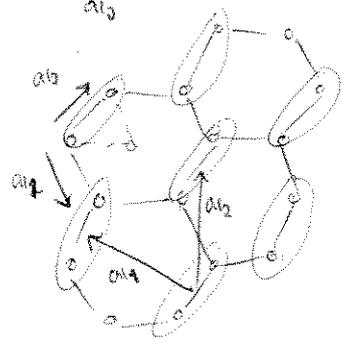
$$\sigma = q \cdot n \cdot \mu = \frac{q^2 n \langle \tau \rangle}{m}$$

Bravaisgitter

- Samling punkter i rummet som har egenskapen att varje punkt har en identisk omgivning
 - oändligt
 - En gitterpunkts position, \vec{R} , anges med 3 heltal och 3 basvektorer
- $$\vec{R} = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3, \quad n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



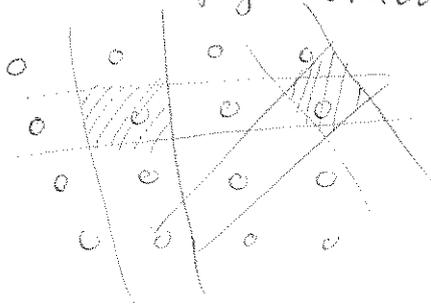
$\vec{R} = 2a_1 + a_2$ primitiva basvektorer (om varje pkt kan nås (ska ej kunna nå extra punkter))



ej bravais, men så ihop punkter → bravais

Enhetscell

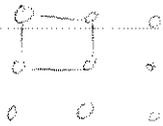
- Minsta möjliga område som vid upprepning skapar hela gittret



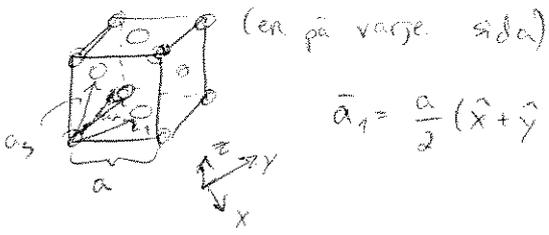
Primitiv enhetscell

$$4 \cdot \frac{1}{4} = 1$$

Innehåller en GP



FCC - Face Centered Cubic



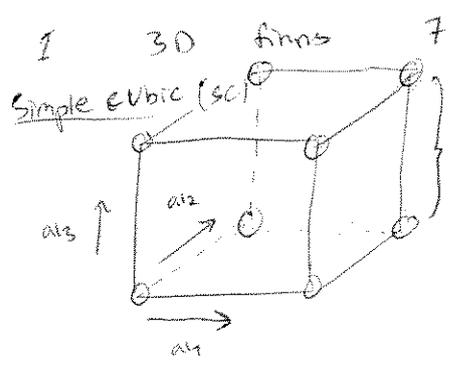
$$\bar{a}_1 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y})$$

$$\bar{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{z})$$

$$\bar{a}_3 = \frac{a}{3} (\hat{y} + \hat{z})$$

Fasta

23/1-14



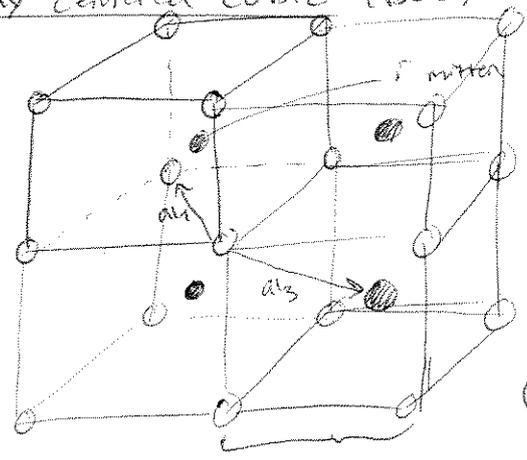
krystallsystem och (hex cubic)

14 Bravaisgitter (3 se i cubic)

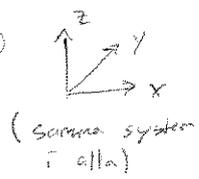
$$\begin{cases} a_1 = a\hat{x} \\ a_2 = a\hat{y} \\ a_3 = a\hat{z} \end{cases}$$

Koordinationsstal = #närmst grannar = CN
CN = 6

Body Centered Cubic (BCC)



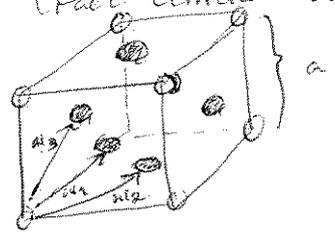
$$\begin{cases} a_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \\ a_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \\ a_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \end{cases}$$



CN = 8

(a₂ går ut ur papret)

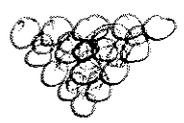
FCC (Face Centered Cubic)



$$\begin{cases} a_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}) \\ a_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \\ a_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \end{cases}$$

Kan även kallas CCP = Cubic Closed Packed
CN = 12

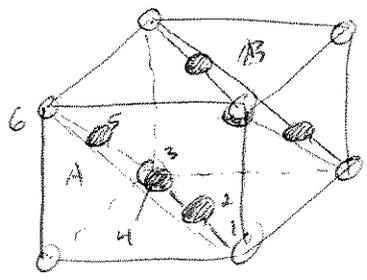
Tätpackning



Lager A
Lager B
Lager C

Man får tätpackning vid ABABAB (HCP) och ABCABC (FCC)

HCP = Hexagonal Closed Packed



ser det röda planet ovanifrån



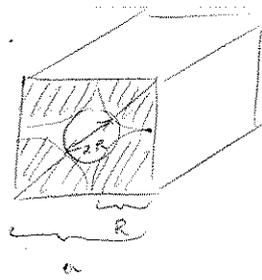
skär i rätt plan

(bättre bild i powerpoint)

Hur tät är atomerna packade?

Packningskvot = $\frac{\text{atomvolym}}{\text{kristallvolym}}$

FCC



$4R = \sqrt{2}a \Rightarrow R = \frac{a}{\sqrt{8}}$

FCC: Antal atomer i cellen:

$\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 4$
 hörn sidor

antal atomer per cell

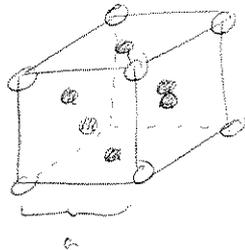
$\frac{\# \text{ atomer/cell} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$

$\frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi (\frac{a}{\sqrt{8}})^3 \cdot \frac{1}{3}}{a^3} = 0,74$

Diamantstruktur

FCC + bas

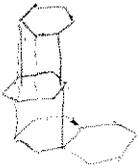
$(0\ 0\ 0)$
 $(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$
 $\frac{1}{4} a\hat{x} + \frac{1}{4} a\hat{y} + \frac{1}{4} a\hat{z}$



\Rightarrow 2 FCC som är förflyttade från varandra med $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ enhetsceller (bild i powerpoint)

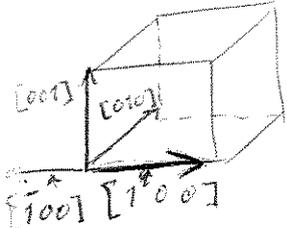
Grafitstrukturen (polymer, samma ämne - olika strukturer)

Ta bort ett lager kol \Rightarrow grafen



Namngivelse av riktningar och plan i kristaller

Millersindex (h, k, l)

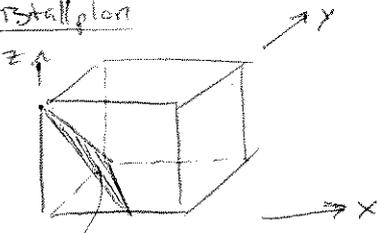


• Negativa riktningar: minus ovanför siffran

• Ekvivalenta riktningar: $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$

t.ex. $[5\ 1\ 3], [5\ 3\ 1], [1\ 3\ 5] \dots \rightarrow \langle 5\ 3\ 1 \rangle$

Kristallplan



(2 1 1) - planet

• Bestämning

1) Bestäm skärningarna med coord. axlar

$(\frac{1}{2}, 1, 1)$

2) Invertera $\Rightarrow (2, 1, 1)$

(Ita komma tecken om ett index ≥ 10 , annars inte)

Ex $(1\ 2\ 4) \xrightarrow{\text{invertera}} (1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}) \xrightarrow{\text{vill ha heltal}} (4\ 2\ 1)$

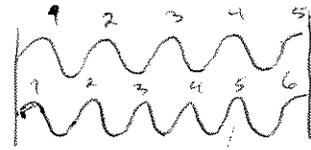
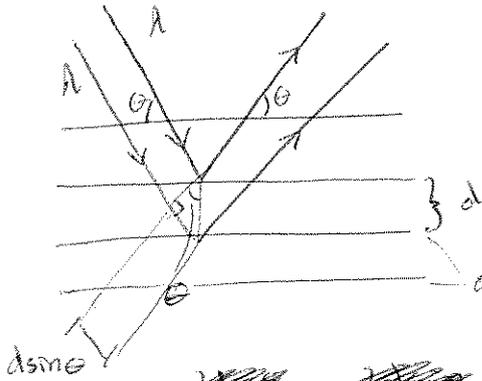
Diffraction

Brages

Anta: spekulär reflektion ($\theta_i = \theta_r$)
Elastisk (energi ingående = energi utgående)

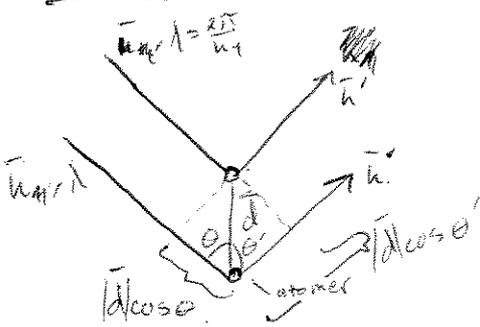
Ingen multipelspridning

Vägskillnaden mellan de två vågorna är $2d \sin \theta$



$2d \sin \theta = n \cdot \lambda$ - brages lag

Lave



$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{n}$
 $\vec{k}' = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{n}'$

Vägskillnaden blir $|d| \cos \theta + |d| \cos \theta' =$
 $= \vec{d} \cdot \hat{n} + (-\vec{d} \cdot \hat{n}') = \vec{d} \cdot (\hat{n} - \hat{n}')$

För konstruktiv interferens $\vec{d} \cdot (\hat{n} - \hat{n}') = m \cdot \lambda$, $m = 0, \pm 1, \pm 2 \Rightarrow \left\{ \frac{2\pi}{\lambda} \cdot m \cdot \lambda \right\} \Rightarrow$
 $\Rightarrow \vec{d} \cdot \left(\frac{2\pi}{\lambda} \hat{n} - \frac{2\pi}{\lambda} \hat{n}' \right) = m \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \lambda \Rightarrow \vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = m \cdot 2\pi$

Om vi betraktar ett stort antal diffractionspunkter i ett gitter måste $\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = m \cdot 2\pi$ gälla för alla punkter.

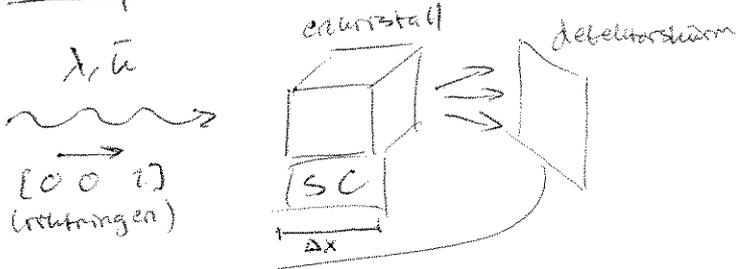
Alla avstånd mellan atomer, \vec{d} , är punkter i ett bravaisgitter \Rightarrow

$\Rightarrow \vec{d} = \vec{R} \Rightarrow \vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \Rightarrow \left[e^{i\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} = e^{i2\pi m} = 1 \right]$

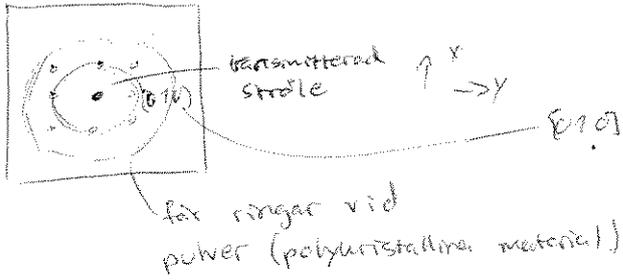
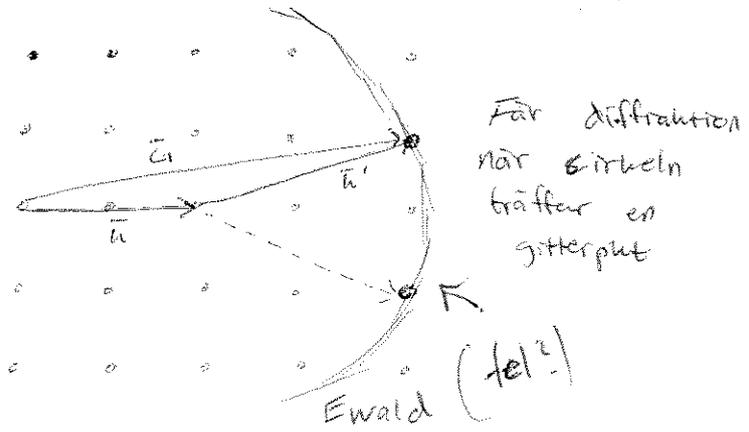
$\left[e^{i\vec{R} \cdot \vec{G}} = 1 \right]$ Reciprokt gitter definition

Konstruktiv interferens förs då $\left[\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G} \right]$ (diffractionsvillkor)

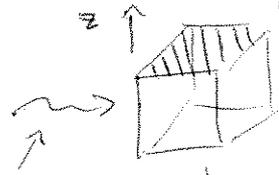
Exempel i 2D



Diffraktionsvillkor: $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$ ($\vec{k} + \vec{k}' = \vec{G}$???)



$[100]$ kommer från diffraction i $[010]$ -planerna i materialet
 $[010]$ -plan



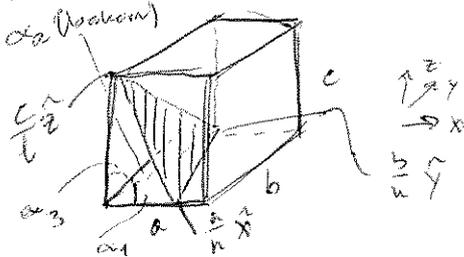
kommer från att plettern (gitter) har volym

Lave mer korrekt

Braggs lättare

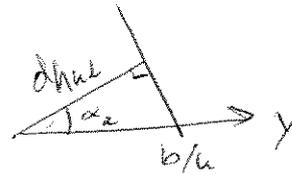
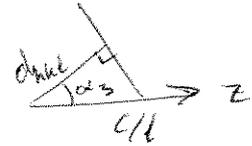
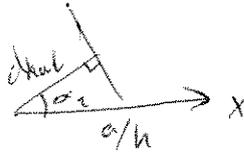
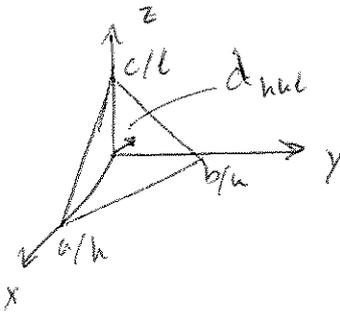
Ekvivalenta plan $(100)(010)(001) = \{100\}$

23/1-14



Definition Avståndet från origo till närmsta plan med Millerindex $hkl =$

d_{hkl}



$$\cos \alpha_1 = \frac{d_{hkl}}{a/h}$$

$$\cos \alpha_2 = \frac{d_{hkl}}{b/h}$$

$$\cos \alpha_3 = \frac{d_{hkl}}{c/l}$$

$$\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_3 = 1$$

$$d_{hkl}^2 \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) = 1 \Rightarrow d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

Kubisk struktur $a=b=c=a \Rightarrow d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

Finns två gitter:

- Reellt (direkt) gitter
- Reciprok gitter

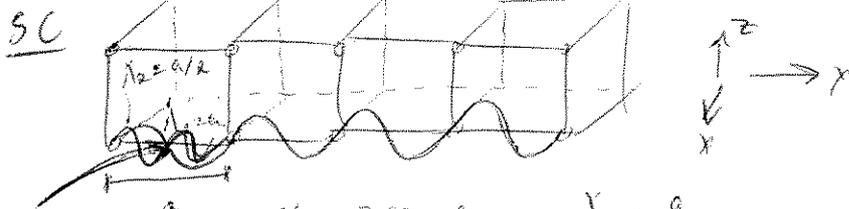
Reciprok gitter

En samling vägvektorer, \vec{G} , av plana vågor, $e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$, som har periodiciteter av Bravais-gittret.

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

$$\Rightarrow e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1$$

~~det~~ föreläsning 2



flyttar med

$$R_1 = a\hat{y}$$

$$R_2 = 2a\hat{y}$$

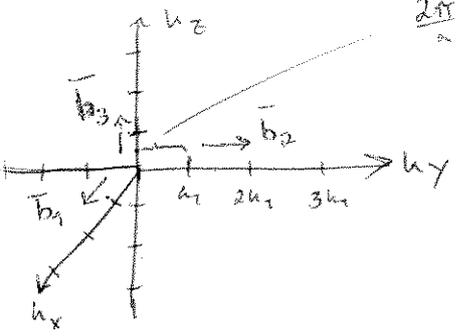
Kan även ta $\lambda_3 = \frac{a}{3}$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (\text{Plan våg } e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) \quad \begin{cases} k = \text{vägvetor} \\ \vec{h} = \text{vägvektor} \end{cases}$$

$$\lambda_1 = \frac{a}{1} = \frac{2\pi}{k_1} \quad \lambda_2 = \frac{a}{2} = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{k_1} \quad \lambda_3 = \frac{a}{3} = \frac{2\pi}{3k_1} \Rightarrow \boxed{k_1 = \frac{2\pi}{a}}$$

För y-riktningen har vi funnit en k-vektor, \vec{k}_1 , som har en periodicitet av Bravaisgittret

Receptrekt gitter



Reciproka gittervektorer, $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$

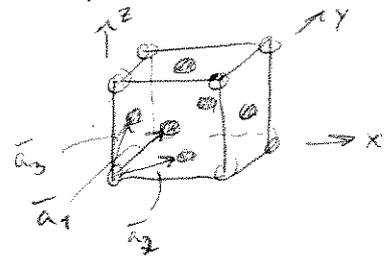
$$\vec{G} = l_1 \vec{b}_1 + l_2 \vec{b}_2 + l_3 \vec{b}_3, \quad l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

motsvarar
 stora \vec{R} i
 reella fallet

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

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

Exempel Reciproka gittret för FCC?



$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

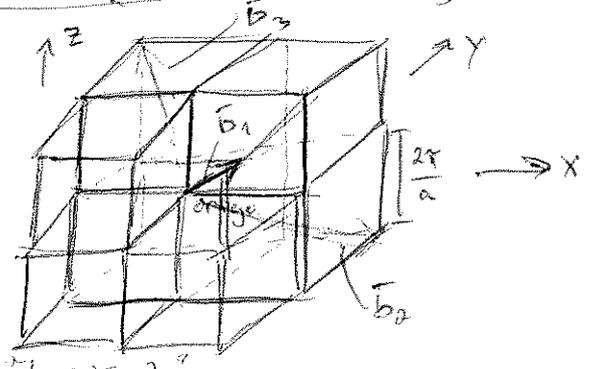
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \left\{ \begin{aligned} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 &= \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ a/2 & a/2 & 0 \\ 0 & a/2 & a/2 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4} \hat{x} - \frac{a^2}{4} \hat{y} + \frac{a^2}{4} \hat{z} \\ \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) &= \{(\hat{x} \cdot \hat{x})=1, \hat{x} \cdot \hat{y}=0, \text{etc}\} \end{aligned} \right\}$$

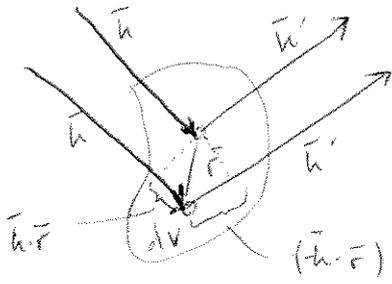
$$\Rightarrow \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) = \frac{2\pi}{a}[1 \bar{1} 1]$$

p.s.s.

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}[1 1 \bar{1}] \quad \vec{b}_3 = [\bar{1} 1 1] \frac{2\pi}{a}$$



← blir typ BCC
(för FCC-gitter är reciproka ett BCC-gitter)



Totala fasskillnaden $\phi = \bar{k}\bar{r} + (-\bar{k}', \bar{r}) = (\bar{k} - \bar{k}') \cdot \bar{r}$

Spridning sker pga växelverkan mellan röntgenljus och ämnets elektrondensitet, $n(\bar{r})$.
Spridningsamplituden från $dV \propto n(\bar{r}) dV e^{i\phi}$

Totalt amplituden:

$$F = \int_{\text{prov}} dV n(\bar{r}) e^{i(\bar{k} - \bar{k}') \cdot \bar{r}} = \int_{\text{prov}} dV n(\bar{r}) e^{-i\Delta k \cdot \bar{r}}, \quad \bar{I} = |F|^2$$

← Bravaisgitter

← prov

$$F = \sum_{R \text{ cell}} \int dV n(\bar{r} + \bar{R}) e^{-i\bar{G}(\bar{r} + \bar{R})}, \quad \text{Bravaisgitter} \Rightarrow n(\bar{r} + \bar{R}) = n(\bar{r})$$

(början på nästa gitter)

$$\Rightarrow F = \sum_{R \text{ cell}} \int dV n(\bar{r}) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}} = N \int_{\text{cell}} dV n(\bar{r}) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}}$$

↑ Helet provet

↑ cell

↑ $S_{\bar{G}}$ strukturfaktorn

$$S_{\bar{G}} = \int_{\text{cell}} dV n(\bar{r}) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}}$$

Vad händer om vi har en bas (struktur = gitter + bas)

Antag s atomer i basen och deras positioner är $\bar{r}_j, j=1,2,3,\dots$

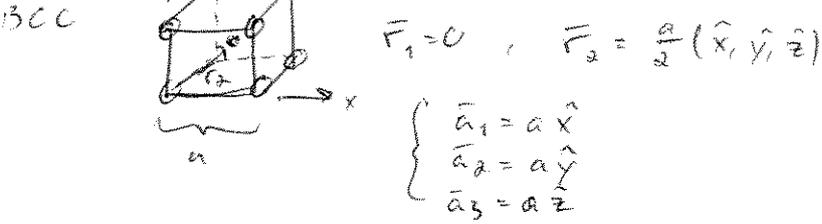
Den totala elektrondensiteten $n(\bar{r})$ skrivs som summa av elektrondensiteter associerade med varje atom j i basen

$$n(\bar{r}) = \sum_{j=1}^s (\bar{r} - \bar{r}_j) n_j \Rightarrow S_{\bar{G}} = \int_{\text{cell}} dV n(\bar{r}) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}} = \sum_{j=1}^s \int dV n_j(\bar{r} - \bar{r}_j) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}} =$$

$$= \left\{ \text{omvand } \bar{d} = \bar{r} - \bar{r}_j \right\} \Rightarrow \sum_{j=1}^s e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}_j} \int dV n_j(\bar{d}) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{d}} = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i\bar{G} \cdot \bar{r}_j}$$

$$f_j = \int dV n_j(\bar{d}) e^{-i\bar{G} \cdot \bar{d}} \leftarrow \text{atomära formfaktorn}$$

Exempel BCC Kan beskrivas som SC + bas där bas är:



Reziproka rummet:

$$\begin{cases} \bar{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \\ \bar{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y} \\ \bar{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z} \end{cases}$$

Strukturfaktorn

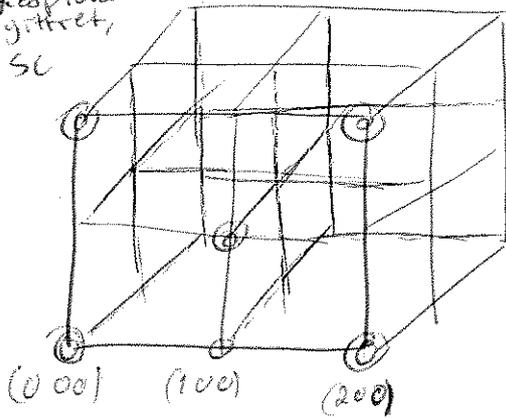
$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^2 e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} = \left\{ \vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}) \right\} = \left\{ \text{formfaktor } f_j = 1 \right\} =$$

$$= \underbrace{e^{-i\vec{G} \cdot 0}}_{=1} + e^{-i \left(\frac{2\pi}{a} (h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}) \cdot \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \right)} =$$

$$= 1 + e^{-i\pi(h+k+l)} = 1 + \underbrace{\cos(\pi(h+k+l))}_{(-1)^{h+k+l}} - \underbrace{i \sin(\pi(h+k+l))}_{=0} = 1 + (-1)^{h+k+l}$$

$$\Rightarrow S_{\vec{G}} = \begin{cases} 2, & h+k+l = \text{j\u00e4mn} \\ 0, & h+k+l = \text{udda} \end{cases}$$

Repprova gitteret, SC



○ - h+k+l j\u00e4mna, bildar FCC



Atomer sitter aldrig exakt där det \u00e4r b\u00e4tt, p.g.a. termiska vibrationer & det \u00e4r polycrystallinitet & korngr\u00e4nser

$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j}, \quad \vec{r}_j(t) = \vec{r}_j + \vec{u}(t)$$

← forskjutning fr\u00e5n j\u00e4mviddsl\u00e4get

Termiska medelv\u00e4rdet

$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} \langle e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle, \quad \langle e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle = 1 - i \underbrace{\langle \vec{G} \cdot \vec{u} \rangle}_{=0} + \frac{1}{2} \langle (\vec{G} \cdot \vec{u})^2 \rangle + \dots \approx$$

Taylorutveckla?

$$\approx 1 - \frac{1}{2} \langle (\vec{G} \cdot \vec{u})^2 \rangle = \frac{(1)}{1 - \frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2 = e^{-i\vec{G} \cdot \vec{u}}}$$

$$= G^2 \langle u^2 \rangle \frac{\langle \cos^2 \theta \rangle}{= 1/3}$$

efters\u00e5n f\u00f6rskjutningar \u00e4r oavskorade och slumpm\u00e4ssiga

Titta på Taylorutvecklingen av

$$e^{-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G} = 1 - \frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2 + \dots \quad (2) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle e^{-i\vec{G}\vec{u}} \rangle = e^{-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow S_{\vec{G}}^{\text{korr}} = \underbrace{\sum_{j=1}^s f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}}_{S_{\vec{G}}} \cdot e^{-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2}$$

27/1-14

(mean square displacement)

Spänningsamplituden $\propto S_{\vec{G}}^{\text{korr}}$

Intensiteten $\propto |S_{\vec{G}}^{\text{korr}}|^2 = |S_{\vec{G}}|^2 e^{-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle G^2}$

Debye-Waller faktorn (DWF)

Harmonisk Oscillator

\Rightarrow Termiska medelvärdet av den potentiella energin $\langle U \rangle = \frac{1}{2} k \langle u^2 \rangle$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

↑
atommassan

equipartitionsprincipen, $\langle U \rangle = \frac{1}{2} k_B T$ per frihetsgrad

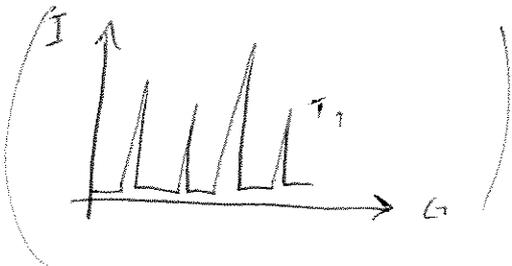
$$\Rightarrow \langle U \rangle = \frac{1}{2} k \langle u^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle u^2 \rangle \omega^2 m = \frac{3}{2} k_B T$$

$$3D \Rightarrow \frac{3}{2}$$

$$\Rightarrow \langle u^2 \rangle = \frac{3k_B T}{m\omega^2} \Rightarrow \left(DWF = e^{-\frac{k_B T G^2}{m\omega^2}} \right)$$

$$\omega = 10^{13} \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

k_B - Boltzmanns konstant

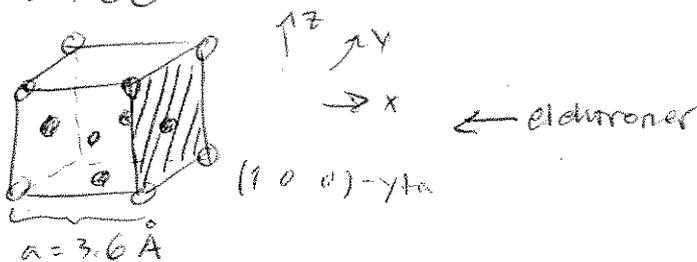


Diffraction i 2D

Elektroner, $E = 50 \text{ eV}$, faller in \perp (1 0 0) - ytan av en enkristall av Cu

• Beräkna vinklarna mellan normalen och de diffrakterade strålarna.

Cu: FCC

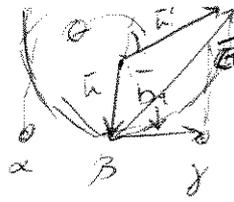
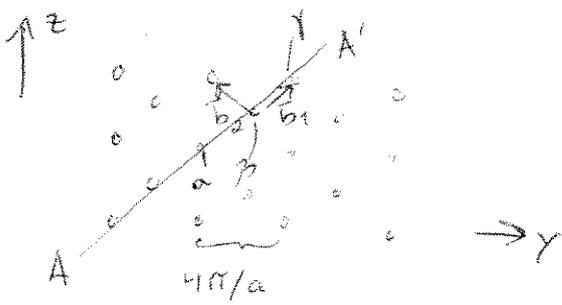


Reciproka gittervektorer

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = \begin{cases} 2\pi, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{a}_3 \rightarrow \infty \end{cases}$$

$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(-\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_3 \rightarrow 0 \cdot \hat{x} \end{cases}$ dvs. de reciproka gitterplanen ligger oändligt tätt i x-riktning \Rightarrow stavar



Stütze AA'

$$|\vec{b}_1| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} = 2.468 \text{ \AA}^{-1} \quad (\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z}))$$

Elektronen $E = 50 \text{ eV} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow |\vec{k}| = 3.6 \text{ \AA}^{-1}$

$$\sin \theta = \frac{|\vec{b}_1|}{|\vec{k}|} \Rightarrow \theta = 43^\circ$$

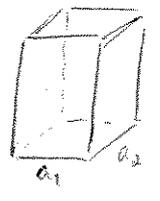
Rättnearning, fasta

27/1-14

54

~~FCC~~ FCC

Tetragonal cell:



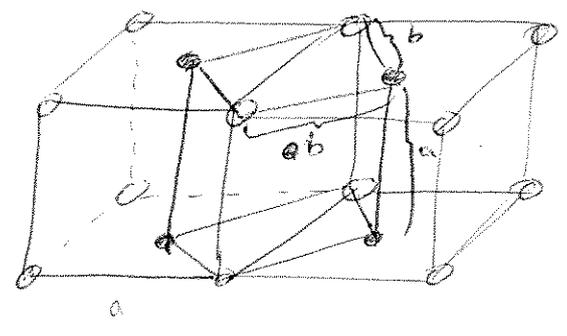
$a_1 = a_2 \neq a_3$

Vinklar 90°

Tetragonala cellen:

$V_2 = b^2 a = \frac{a^3}{2} = \frac{V_1}{2}$

$N_2 = \frac{1}{8} \cdot 8 + 1 = 2$



$b = \frac{\sqrt{2} a}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}}$

Kubiska cellen:

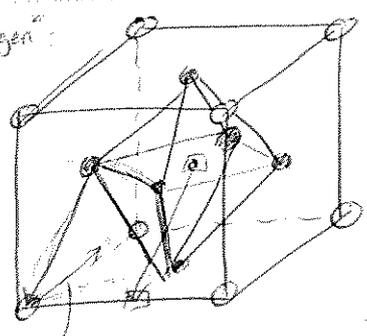
$V_1 = a^3$

$N_1 = \frac{1}{8} \cdot 8 + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$

$\frac{N}{V} = \frac{N_1}{V_1} = \frac{N_2}{V_2} = \frac{4}{V_1}$

55

Mellanlägg:



$\vec{x} = (t, t, t)$

Oktaeder $a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, grön punkt

$a(\frac{1}{2}, 0, 0)$

$a(0, \frac{1}{2}, 0)$

$a(0, 0, \frac{1}{2})$

Tetraeder, koordinater: $\vec{0} = (0, 0, 0)$

rött

$\vec{v}_1 = (a\frac{1}{2}, a\frac{1}{2}, 0)$

$a(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

$a(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

Mitt i tetraeder

$|\vec{x} - \vec{0}|^2 = |\vec{x} - \vec{v}_1|^2 \Rightarrow$

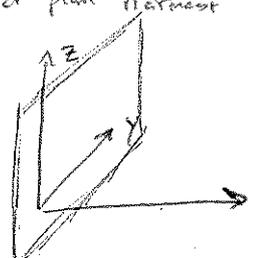
$\Rightarrow 3t^2 = t^2 + (t - \frac{a}{2})^2 \Rightarrow t = \frac{a}{4}$

57 Ortotorombiskt gitter: $\vec{R} = p a \hat{x} + q b \hat{y} + r c \hat{z}$, p, q, r heltal

Reciproka gittervektorer: $\vec{G}_{hkl} = 2\pi (\frac{h}{a} \hat{x} + \frac{k}{b} \hat{y} + \frac{l}{c} \hat{z})$

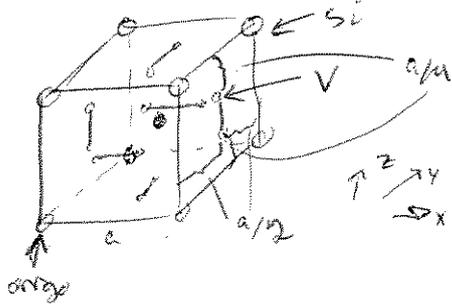
$\vec{R} \cdot \vec{G} = 2\pi (ph + qn + rl) \Rightarrow e^{i\vec{R} \cdot \vec{G}} = 1$ som är definitionen av reciproka gitter

Plan (hkl) $\perp \vec{G}_{hkl} \propto \hat{n}$, $\hat{n} = (\frac{h}{a} \hat{x} + \frac{k}{b} \hat{y} + \frac{l}{c} \hat{z}) / \sqrt{(\frac{h}{a})^2 + (\frac{k}{b})^2 + (\frac{l}{c})^2}$
 För plan närmast med $\vec{0}$ genom origo



$\vec{x} = d \hat{n} + \vec{x}_\perp$ ($\vec{x}_\perp \cdot \hat{n} = 0$)

S6 V_3Si

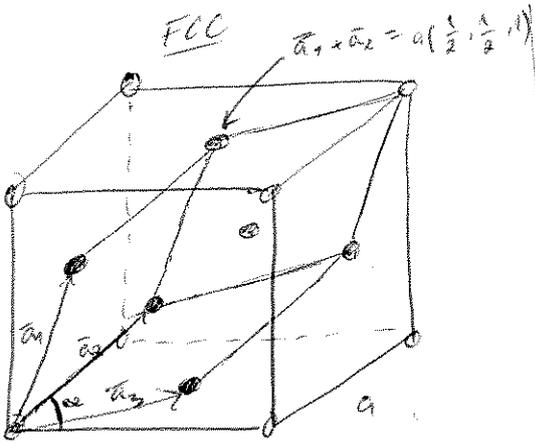


Kubiskt gitter, kantlängd a

Bas $Si \begin{cases} (0, 0, 0) \\ a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{cases}$

V $\begin{cases} a(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0) \\ a(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0) \\ a(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}) \\ a(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}) \\ a(\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{2}) \\ a(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{2}) \end{cases}$ botten

S8



$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)$, $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1)$, $\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)$

Volym: $V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{a^3}{4} = \frac{V_{kub}}{4}$ (1 atom \Rightarrow primitiv)

fcc $\cos \alpha = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{|\vec{a}_1|^2} = \frac{a^2/4}{2 \cdot a^2/4} = \frac{1}{2}$

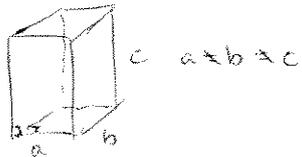
S7 För kubiska gitter gäller

Vi ska att för 2D kvadratiske gitter

$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2}}$

avstånd mellan plan (längd i 2D)

(Ortorombiskt?)

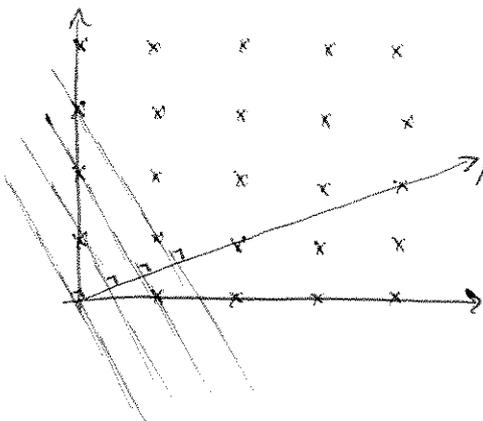


2D Plan (h k) \perp mot

$\frac{h}{a} \hat{x} + \frac{k}{b} \hat{y} = \vec{N}$

Gittervektorer $pax + qby$ p, q heltal

$d = \vec{r} \cdot \vec{n} = \frac{1}{2} \hat{x} \cdot \left(\frac{2\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{5}} \right) = \frac{1}{\sqrt{5}}$



bca, kvadratiske

Ex: $hk = (2 \ 1)$

linje närmast origo (ej genom) går genom $(\frac{1}{2}, 0) = \vec{x}$ och $(0, 1)$.

Alltså: snett x-axeln i $\frac{a}{h}$ och

y-axeln i $\frac{a}{k}$

Generalisering: snett x-axeln i $\frac{a}{h}$

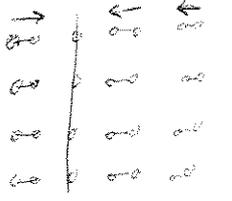
$\hat{n} = \frac{(h\hat{x} + k\hat{y})}{\sqrt{h^2 + k^2}} \Rightarrow$

$d = \frac{a}{h} \hat{x} \cdot \hat{n} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2}}$

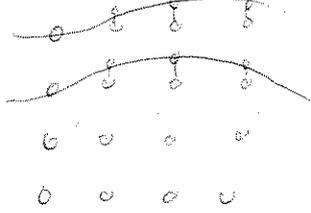
Gittervibrationer

30/1-14

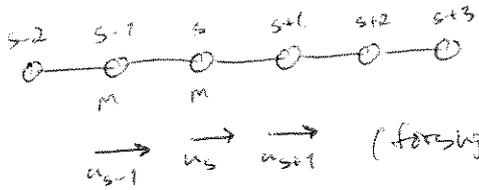
Longitudinella vågor



Transversella vågor

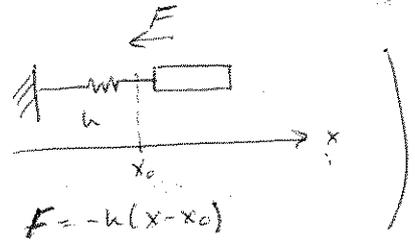


1D linjär enatomig kedja



Antar: $u \ll a$, $T \ll T_{smält}$
Växelverkan endast mellan närmsta grannar

(Hooke's lag



Kraft på atom s:

$$F_s = -\phi(u_{s+1} - u_s) + \phi(u_{s-1} - u_s) = -\phi(2u_s - u_{s+1} - u_{s-1})$$

$$F_s = m \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \phi(2u_s - u_{s+1} - u_{s-1}) \quad \Delta$$

Ansats: $u_s = u_0 e^{i(ksa - \omega t)}$

$$\frac{du_s}{dt} = -i\omega u_0 e^{i(ksa - \omega t)}, \quad \frac{d^2 u_s}{dt^2} = -\omega^2 u_0 e^{i(ksa - \omega t)} \quad *$$

In med * i Δ :

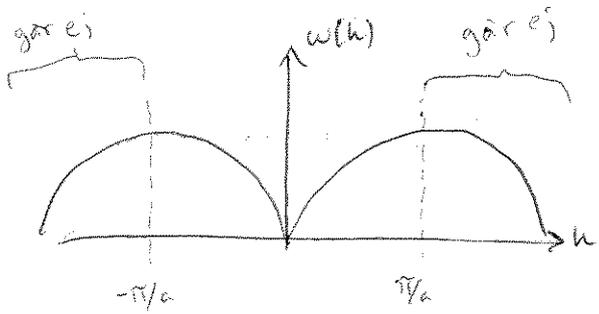
$$m \cdot u_0 \omega^2 e^{i(ksa - \omega t)} = \phi(2u_0 e^{i(ksa - \omega t)} - u_0 e^{i(k(s+1)a - \omega t)} - u_0 e^{i(k(s-1)a - \omega t)})$$

Div med $u_0 e^{i(ksa - \omega t)} \Rightarrow$

$$\Rightarrow m\omega^2 = \phi \left(\frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2\cos ka} - 2 \right) = 2\phi(\cos ka - 1) \Leftrightarrow \frac{m\omega^2}{2\phi} = (-2\sin^2(\frac{ka}{2})) \quad \left(\begin{array}{l} 2\sin^2 x = 1 - \cos 2x \\ \cos 2x = 1 - 2\sin^2 x \\ 2x = ka \Rightarrow \\ \cos ka = 1 - 2\sin^2(\frac{ka}{2}) \end{array} \right)$$

$$m\omega^2 = -4\phi \sin^2(\frac{ka}{2}), \quad -\phi = C \Rightarrow \omega^2 = \frac{4C}{m} \sin^2(\frac{ka}{2}) \Rightarrow$$

$\omega = \pm \sqrt{\frac{4C}{m}} \left| \sin(\frac{ka}{2}) \right| = \omega(k) \quad \leftarrow$ Dispersionsrelation (relaterar frekvens med våglängd)

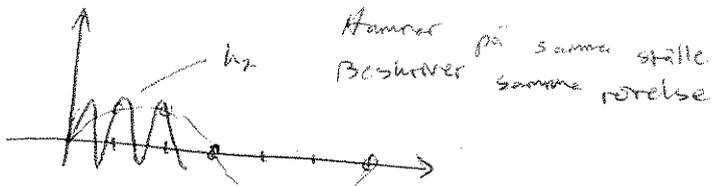


$$\lambda_{\min} = 2a \Rightarrow k_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{a}$$

$$k, k + \frac{2\pi}{a}$$

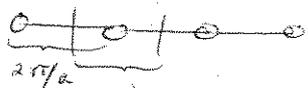
$$u_s^k = e^{i(kx - \omega t)}, \quad u_s^{k+\frac{2\pi}{a}} = e^{i((k+\frac{2\pi}{a})x - \omega t)} = e^{i(kx - \omega t)} \cdot e^{i2\pi m} = e^{i(kx - \omega t)} \cdot 1$$

Erstatning



$$\text{Test: } k_2 = k_1 + \frac{2\pi}{a} = \frac{7\pi}{3a} \Rightarrow \lambda_2 = \frac{6a}{7}$$

Rec. gir

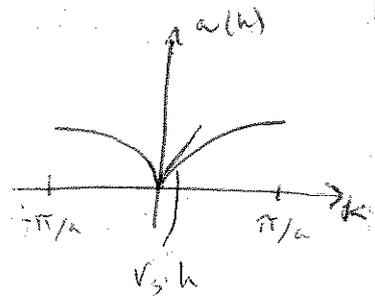


$(-\pi/a, \pi/a)$, første Brillouinzone

i) $k \ll \pi/a \quad (\lambda \gg a)$

$$\Rightarrow \omega \approx \sqrt{\frac{4c}{m}} \sin \frac{ka}{2} \approx \sqrt{\frac{4c}{m}} \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{ca^2}{m}} \cdot k = v_s \cdot k$$

$v_s = \text{lyd hastighet}$

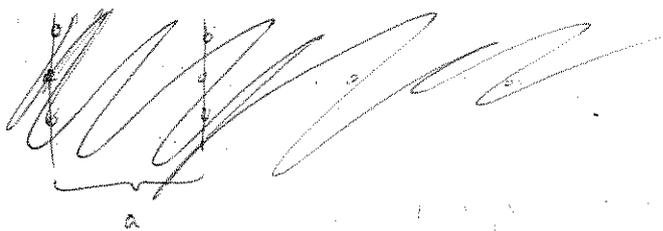


ii) Grupp hastighet: $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \left\{ \omega = \sqrt{\frac{4c}{m}} \sin \frac{ka}{2} \right\} \Rightarrow$

$$\Rightarrow v_g = \sqrt{\frac{4ca^2}{m}} \cos \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{ca^2}{m}} \cdot \cos\left(\frac{ka}{2}\right), \quad v_g(k = \pm \frac{\pi}{a}) = 0$$

(stående v_g)

Vad händer mer vid $k = \pm \frac{\pi}{a}$?



Bragg

$$\theta = 90^\circ$$

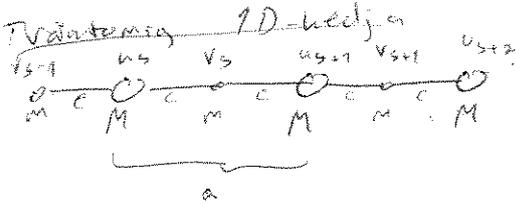
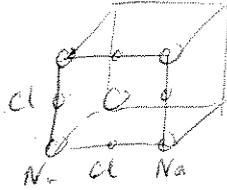
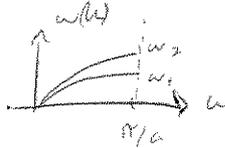
$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad n\lambda = 2a \sin \theta \rightarrow n \cdot \lambda = 2a$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow k = n \cdot \frac{\pi}{a} \Rightarrow \text{Bragg villkor}$$

uppfyllt för $k = \pm \frac{\pi}{a}$

Generellt

Med en atom i basen fås 3 st vägnoder, 1 longitudinell
2 transversella



Vi tittar på longitudinell våg:

$$F_s^M = -c(u_s - u_{s-1}) - c(u_s - u_{s+1}) = c(2u_s - u_{s-1} - u_{s+1})$$

$$F_s^m = c(2u_s - u_{s-1} - u_{s+1})$$

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c(2u_s - u_{s-1} - u_{s+1}) \quad (1)$$

$$m \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c(2v_s - u_{s-1} - u_{s+1}) \quad (2)$$

$$\begin{cases} u_s = u_0 e^{i(ksa - \omega t)} & (3) \\ v_s = v_0 e^{i(ksa - \omega t)} & (4) \end{cases}$$

$$-M\omega^2 u_0 e^{i(ksa - \omega t)} = c(2u_0 e^{i(ksa - \omega t)} - v_0 e^{i(ksa - \omega t)} - v_0 e^{i(k(s-1)a - \omega t)}) \quad (*)$$

$$\frac{d^2 u_s}{dt^2} = \dots = -\omega^2 u_0 e^{i(ksa - \omega t)} \quad (5)$$

$$\frac{d^2 v_s}{dt^2} = \dots = -\omega^2 v_0 e^{i(ksa - \omega t)} \quad (6)$$

$$(*) \Leftrightarrow -M\omega^2 u_0 = c(2u_0 - v_0 - v_0 e^{-ika}) \Leftrightarrow M\omega^2 u_0 - v_0 c(1 + e^{-ika}) + 2c u_0 = 0$$

$$\Leftrightarrow u_0 (M\omega^2 + 2c) - v_0 (c(1 + e^{-ika})) = 0 \quad (7)$$

p.s.s. (6), (3) och (4) i (2) \Rightarrow

$$\Rightarrow u_0 (c(1 + e^{ika})) + v_0 (m\omega^2 - 2c) = 0 \quad (8)$$

(7) och (8), lösning fås om determinanten för koef. (u_0, v_0) = 0

$$-(M\omega^2 + 2c)(m\omega^2 + 2c) + c^2(1 + e^{ika})(1 + e^{-ika}) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Rightarrow Mm\omega^4 + 2M\omega^2 c + 2cm\omega^2 + 4c^2 - c^2(1 + e^{ika} + e^{-ika} + 1) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow Mm\omega^4 + 2c(M+m)\omega^2 + 4c^2 - c^2(2 + 2\cos ka) = 0$$

$$4\cos^2 \frac{ka}{2} \quad \left(\cos^2 x = \frac{1 + \cos 2x}{2} \right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \omega^4 + \frac{2c}{Mm} \omega^2 (M+m) + \frac{4c^2}{Mm} \underbrace{(1 - \cos^2 \frac{ka}{2})}_{\sin^2 \frac{ka}{2}} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \omega^4 + \frac{2c(M+m)}{Mm} \omega^2 + \frac{4c^2}{Mm} \sin^2 \frac{ka}{2} = 0 \Rightarrow$$

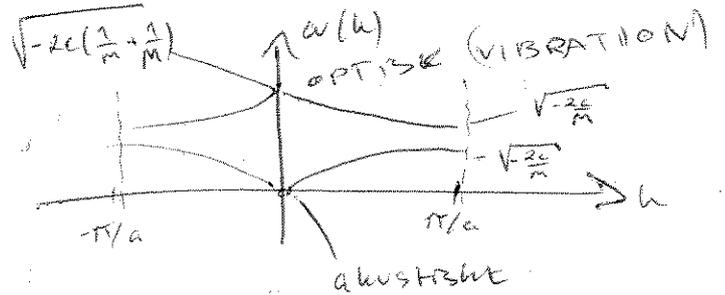
$$\omega^2 = -\frac{c(M+m)}{Mm} \pm \sqrt{\left(-\frac{c(M+m)}{Mm}\right)^2 - \frac{4c^2}{Mm} \sin^2 \frac{ka}{2}}, \text{ L\u00e4t } A = \frac{-c(M+m)}{Mm}, B = \frac{4c^2}{Mm}$$

$$\omega^2 = A \pm \sqrt{A^2 - B \sin^2 \frac{ka}{2}}$$

$$e) \quad k=0 \Rightarrow \omega^2 = A \pm A$$

$$\begin{cases} \omega_+^2(k=0) = 2A = -2c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \\ \omega_-^2(k=0) = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \omega_+^{k=0} = \sqrt{-2c \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)} \\ \omega_-^{k=0} = 0 \end{cases}$$



$$u_0 (M\omega^2 + 2c) - v_0 (c(1 + e^{-ika})) = 0$$

$$k=0 \Rightarrow \frac{u_0}{v_0} = \frac{2c}{(M\omega^2 + 2c)}$$

$$\begin{cases} \omega_+^2(k=0) = -2 \frac{c(M+m)}{Mm} \\ \omega_-^2(k=0) = 0 \end{cases} \Rightarrow$$

$\frac{u_0}{v_0} = \frac{m}{M} < 0$ (atomerna rör sig åt olika håll) (optisk)
 $\frac{u_0}{v_0} = 1$ (atomerna rör sig i fas med samma amplitud) (akustisk)

(akustisk)



optisk



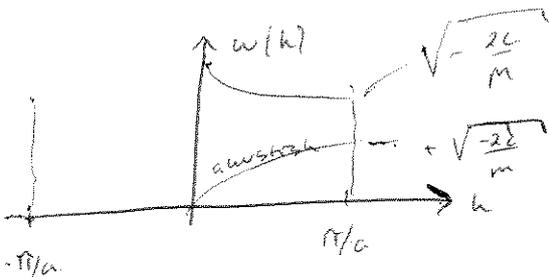
akustisk

00) $k = \frac{\pi}{a}$

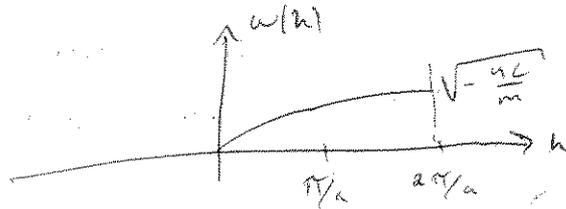
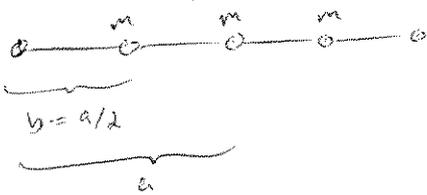
$$\omega^2 = A \pm \sqrt{A^2 - B \sin^2 \frac{ka}{2}} \quad (A, B \text{ samma som innan})$$

$$\omega_+^2(k = \pi/a) = A + \sqrt{A^2 - B} = -\frac{2a}{M} \Rightarrow \omega_+(k = \pi/a) = \sqrt{-\frac{2c}{M}} \quad \text{OPTISK GREN}$$

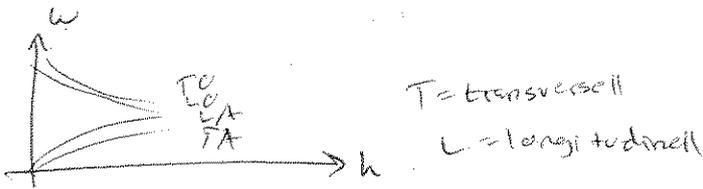
$$\omega_-(k = \pi/a) = \sqrt{-\frac{2c}{m}} \quad \text{AKUSTISK GREN}$$



Vad händer då $m = M$? \Rightarrow
 $\Rightarrow \omega_+(k = \pi/a) = \omega_-(k = \pi/a) = \sqrt{-\frac{2c}{m}}$

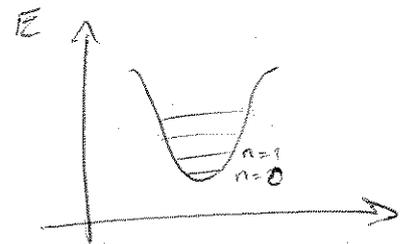


3D-kristall med s atomer i basen har alltid $\begin{cases} 3 \text{ akustiska noder} \\ 3(s-1) \text{ optiska noder} \end{cases}$



Fononer

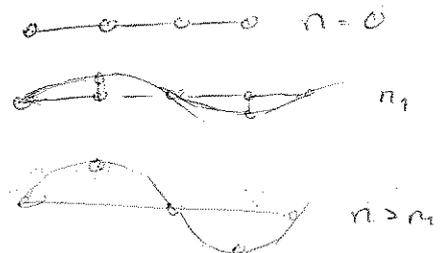
$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \quad \text{nollpunktsenergi} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

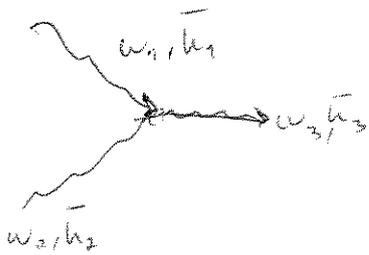


Bose-Einstein statistik

fononer vid en viss temperatur och frekvens (ω)

$$f_{BE}(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$$

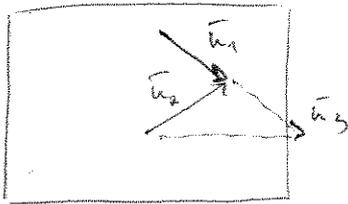




$$\omega_1 + \omega_2 = \omega_3$$

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3$$

$$|\vec{k}| \text{ inom } (-\pi/a, \pi/a)$$



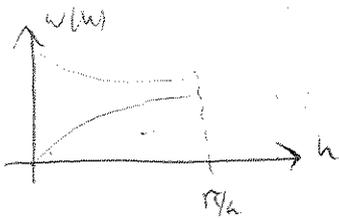
$|\vec{k}_3| > \pi/a \Rightarrow$ subtrahera/addera en vektor $\frac{2\pi}{a}n$

Umlapp processen

$-\pi/a$ π/a

(bättre bild
botten 2)

Värme kapacitet



Fononernas bidrag till värmekapacitet C.

Beräkna först bidraget från en fonon och summerna över alla existerande

Medelenergi för en fonon $\bar{E} = \frac{\sum_n P_n E_n}{\sum_n P_n}$ $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$
 P_n ges av Boltzmann-statistik $(e^{-E_n/k_B T})$ $P_n =$ Sannolikheten att fononen är på nivå n

$$\bar{E} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega e^{-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega / k_B T} \right) / \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega / k_B T} \right)$$

Sätt $Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega / k_B T} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \frac{dZ}{dT} = \sum_{n=0}^{\infty} (n + \frac{1}{2}) \frac{\hbar \omega}{k_B T^2} e^{-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega / k_B T} = \frac{1}{k_B T^2} \sum_{n=0}^{\infty} (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega e^{-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega / k_B T}$$

$$\bar{E} = k_B T^2 \cdot \frac{1}{Z} \cdot \frac{\partial Z}{\partial T} = k_B T^2 \frac{\partial (\ln Z)}{\partial T}$$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega / k_B T} = e^{-\hbar \omega / k_B T} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \hbar \omega / k_B T}$$

Sätt $X = e^{-\hbar \omega / k_B T}$

$$x < 1 \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$$

$$Z = e^{-\hbar\omega/2k_B T} \sum_0^{\infty} e^{-n\hbar\omega/k_B T} = e^{-\hbar\omega/2k_B T} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}}$$

$$\ln(Z) = -\frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \ln\left(\frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}}\right) =$$

$$= -\frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \underbrace{\ln(1)}_{=0} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}) = \ln(Z)$$

$$\bar{E} = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}) \right) = \left\{ \text{derivat med } e^{-\hbar\omega/k_B T} \right\}$$

$$= k_B T^2 \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T^2} - \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \frac{e^{-\hbar\omega/k_B T}}{1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}} \right) = \frac{\frac{1}{2} \hbar\omega - \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}}{1} = \bar{E}$$

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

noipunktenergi

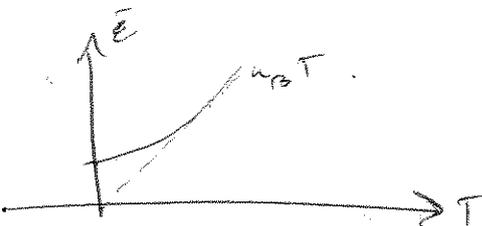
$$T \text{ l\u00e5g} \Rightarrow \bar{E} = \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad T \text{ h\u00f6g} \Rightarrow \bar{E} = \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 + \dots - 1}$$

($k_B T \gg \hbar\omega$)
(expandera)

$$= \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{k_B T \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \dots\right)} = \frac{1}{2} \hbar\omega + k_B T \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \dots\right) \Rightarrow$$

($\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$)

$$\Rightarrow \bar{E} = \frac{1}{2} \hbar\omega + k_B T \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \dots\right) = \frac{1}{2} \hbar\omega + k_B T - \frac{1}{2} \hbar\omega \approx \boxed{k_B T = \bar{E}_n}$$



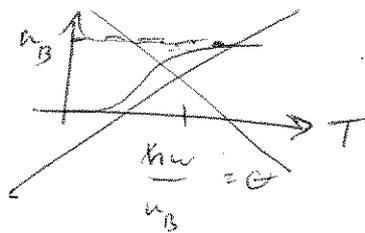
V\u00e4rmekapaciteten

$$C = \frac{d\bar{E}}{dT}$$

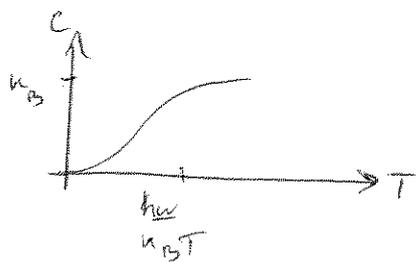
$$C = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \right) = \frac{d}{dT} \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \right) = -\hbar\omega \frac{(-\hbar\omega)}{(k_B T)^2} \left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 \right)^{-2} e^{\hbar\omega/k_B T} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C = \left(\frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \frac{1}{k_B} \cdot \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{\left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 \right)^2}, \quad \text{L\u00e5t } \frac{\hbar\omega}{k_B} = \theta \rightarrow$$

$$\Rightarrow C = \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 k_B \frac{e^{\Theta/T}}{(e^{\Theta/T} - 1)^2}$$



Värmekapacitet för en fonon



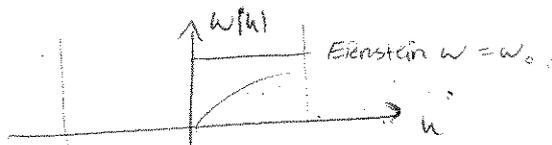
$$C = \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 k_B \frac{e^{\Theta/T}}{(e^{\Theta/T} - 1)^2}, \quad \Theta = \frac{h\nu}{k_B}$$

Vd hög T: $C \rightarrow k_B$, $\frac{d}{dT} \bar{E}_{\text{hög}} = \frac{d}{dT} (k_B T)$

Värmekapacitet för hela kristallen?

N atomer, antar att atomerna vibrerar med samma frekvens

hel kristall $C_{\text{hög T}} = k_B \cdot 3N$ Einstein, all vid hög temp



Vad är distributionen av vibrationsfrekvens?

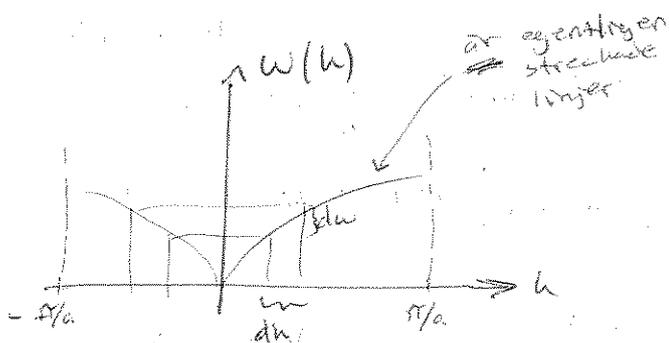
Tillståndstäthet $D(\omega)$

= # fononer som funktion av fononernas frekvens

$D(\omega) = 1D?$

1D lingar, enatomig kedja

$$\omega^2 = \frac{4c}{m} \sin^2\left(\frac{kx}{2}\right)$$



$D(\omega)d\omega = 2N(k)dk$, $D(\omega)d\omega = \#$ fonontillstånd med en frekvens inom intervallet k till $k + dk$

$N(k)dk = \#$ k-värden vid k inom dk

$$D(\omega) = 2N(k) \frac{dk}{d\omega} = 2N(k) \left(\frac{d\omega}{dk}\right)^{-1}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4c}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{c}{m}} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{d\omega}{dk} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \omega^2 = \frac{4c}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\omega^2 m}{4c} \\ \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = \sqrt{1 - \frac{\omega^2 m}{4c}} \end{cases} \quad (2)$$

$$1) \& (2) \Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = a \sqrt{\frac{c}{m}} \sqrt{1 - \frac{\omega^2 m}{4c}} = a \sqrt{\frac{c}{m}} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4c/m}} \Rightarrow$$

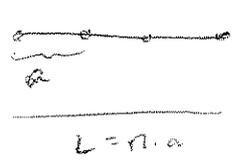
$$\Rightarrow \dots = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{4c}{m} - \omega^2} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$D(\omega) = 2N(\omega) \left(\frac{d\omega}{dk} \right)^{-1}$$

\uparrow
 $\frac{a}{2} \sqrt{\frac{4c}{m} - \omega^2}$

Antal $N+1$ atomer

Periodisk RV



$$\begin{cases} u_s = u_0 e^{i(ksa - \omega t)} \\ u_{s+1} = u_{s-N+1} \end{cases} \Rightarrow u_0 e^{i(ksa - \omega t)} = u_0 e^{i((N+1)a - \omega t)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow e^{ikhNa} = 1 \Rightarrow khNa = 2\pi n \Rightarrow k = \frac{2\pi}{Na} n = \frac{2\pi}{L} \cdot n$$

$$N(k) = \frac{1}{(2\pi/L)} = \frac{L}{2\pi} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow D(\omega) = 2N(\omega) \left(\frac{d\omega}{dk} \right)^{-1} = 2 \cdot \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{2}{a} \sqrt{\frac{1}{\frac{4c}{m} - \omega^2}} = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\frac{4c}{m} - \omega^2}} = D(\omega)$$

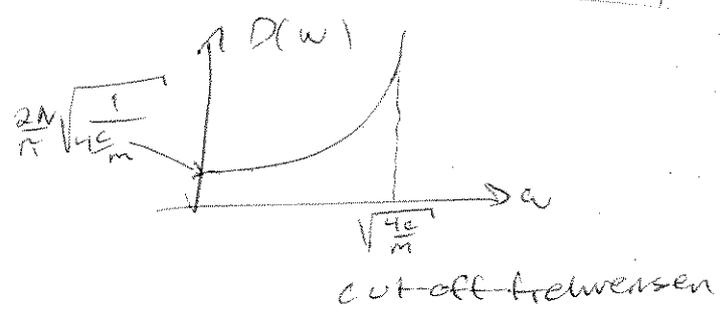
Medelenergi för en fonon:

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$$

Totala energin (1 dimension)

$$E = \int_0^\infty \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right) D(\omega) d\omega$$

$$C = \frac{dE}{dT}$$



Tillståndstäthet i 3D

3/2-14

$N \times N \times N = N^3$ atomer, $V = L^3$, $L = Na$.

\Rightarrow periodiska randvillkor, $e^{i\vec{k} \cdot \vec{L}} = 1 \Rightarrow \begin{cases} e^{ik_x L} = 1 \\ e^{ik_y L} = 1 \\ e^{ik_z L} = 1 \end{cases}$

$\Rightarrow \begin{cases} k_x = \frac{2\pi}{L} \cdot n_x \\ k_y = \frac{2\pi}{L} \cdot n_y \\ k_z = \frac{2\pi}{L} \cdot n_z \end{cases} \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

\downarrow transv
 \downarrow longitud

$N(k) = \frac{1}{(2\pi/L)^3} \quad D(\omega) d\omega = 3N(k) dk$

$D(\omega) d\omega = 3 \cdot \frac{V}{8\pi^2} \cdot d^3k$

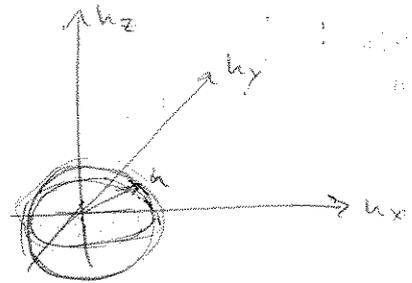
Volymselement: $4\pi k^2 dk$

$D(\omega) d\omega = \frac{3V k^2}{2\pi^2} dk$

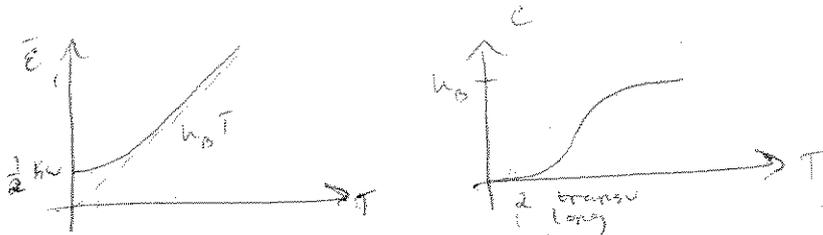
$D(\omega) = \frac{3V k^2}{2\pi^2} \left(\frac{dk}{d\omega} \right)$

$E = \int_0^\infty \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right) D(\omega) d\omega$

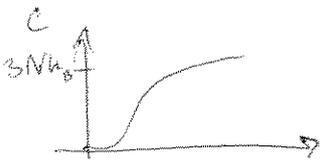
\leftarrow Tillståndstäthet i k -rummet



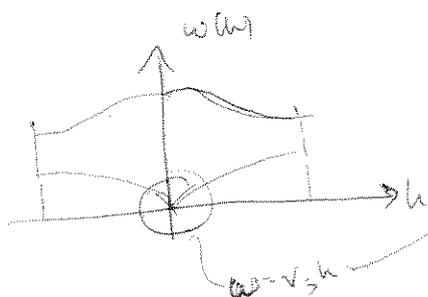
För en fonon



o Hög temperatur: $C(T \text{ hög}) = 3N h_b$



o Låg temperatur



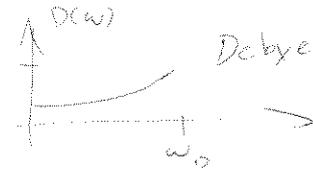
$\Leftrightarrow \left| \begin{aligned} v = \frac{\omega}{v_s} \Rightarrow \frac{dv}{d\omega} = \frac{1}{v_s} \end{aligned} \right|$

Debye

v_s samma för alla meder och gäller upp till en viss frekvens, ω_D , och värdet k_D

$$D(\omega) = \frac{3V \omega^2}{2\pi^2 v_s^3} \frac{d\omega}{d\omega} \Rightarrow D(\omega) = \frac{3V \omega^2}{2\pi^2 v_s^3} \quad (\text{antal former vid en viss frekvens})$$

ω_D ?



Per definition är totalt antalet meder $3N$

$$3N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V \omega^2}{2\pi^2 v_s^3} d\omega = \frac{V}{2\pi^2 v_s^3} \omega_D^3$$

$$\omega_D = \sqrt[3]{\frac{6N \pi^2 v_s^3}{V}} \quad \text{Debyefrekvens,} \quad k_D = \frac{\omega_D}{v_s} = \sqrt[3]{\frac{6N \pi^2}{V}} \quad \text{Debyevärdet}$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} \quad \text{Debyetemp}$$

$$\omega = v_s \cdot k = a \sqrt{\frac{\epsilon}{m}} k$$

$$\left\{ \begin{aligned} D(\omega) &= \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \omega^2 \\ \omega_D^3 &= \frac{6N \pi^2 v_s^3}{V} \end{aligned} \right. \quad \omega_D^3 \cdot V \cdot 3 = 6N \pi^2 v_s^3 \cdot 3 \Leftrightarrow \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} = \frac{6N \cdot 3}{\omega_D^3} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} = \frac{9N}{\omega_D^3} \Rightarrow \boxed{D(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2}$$

$$E = \int_0^{\omega_D} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right) D(\omega) d\omega = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \right) \omega^2 d\omega =$$

$$= \frac{9N \hbar \omega_D}{8} + \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega^3}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega$$

nytt noltpunktenergi!

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega^3 e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} d\omega$$

$$x_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B T} = \Theta_D / T$$

$$C = 9N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

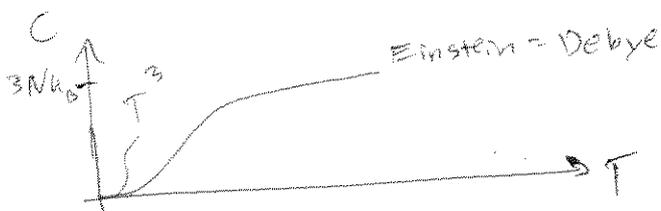
Låg T $x_D \rightarrow \infty, C \rightarrow 9N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \frac{4\pi^4}{15} = \frac{12\pi^4}{5} N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$

Hög T $x_D \rightarrow 0, C \rightarrow 9N k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3 \rightarrow 3N k_B$

$$\Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$$

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$$

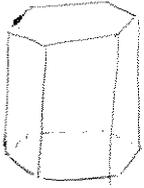
Debyes T^3 -lag



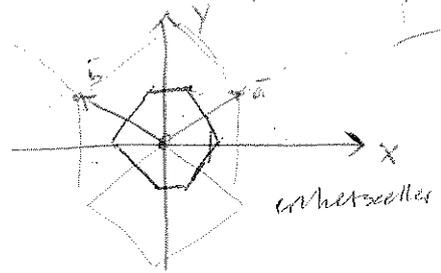
D2/

Rotneering

3/2-14



$$\begin{cases} \vec{a} = \frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{y} \\ \vec{b} = -\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{y} \\ \vec{c} = c \hat{z} \end{cases}$$



Basvektorer i reciproka gitteret

$$\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi, \quad \vec{A} \cdot \vec{b} = \vec{A} \cdot \vec{c} = 0, \quad \vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{a \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

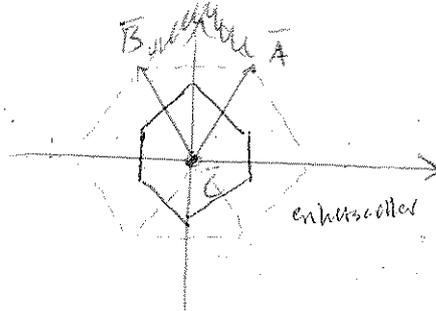
$$\vec{b} \times \vec{c} = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{y}\right) \times c \hat{z} = \frac{ac}{2} (\sqrt{3} \hat{y} + \hat{x})$$

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{a^2 c}{2} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y}\right) \cdot (\hat{x} + \sqrt{3} \hat{y}) = \frac{a^2 c \sqrt{3}}{2} \Rightarrow$$

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{y} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{x}\right)$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{y} - \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{x}\right)$$

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{c} \hat{z}$$



18 KCl, KBr - har NaCl-struktur.

Röntgen diffraktion - görs.

KBr 111 200 220 311 222

KCl 200 220 222

Förklara skillnaderna.

K: atomnummer 19, alkalimetall



Cl: atomnummer 17, halogener



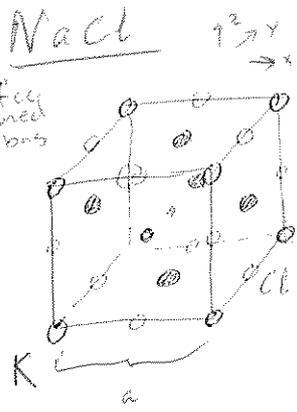
Br: atomnummer 35, halogener



K^+ och Cl^- har liknande elektronstrukturer (Ar) \Rightarrow liknande

bindningsstyrka





SC: $\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$ ← typ som K^+ och Cl^- är lika

Om röda = gröna (samma sorts atom) \Rightarrow
 $\Rightarrow G$ motsvarande SC med gitterkonstant $a/2 \Rightarrow$
 $\Rightarrow \vec{G} = \frac{2\pi}{(a/2)} (h'\hat{x} + k'\hat{y} + l'\hat{z}) = \frac{2\pi}{a} (2h'\hat{x} + 2k'\hat{y} + 2l'\hat{z}) \Rightarrow$
 $\Rightarrow \vec{G}$ med jämna index

Om röda \neq gröna kommer man att se reflektioner motsvarande fcc SC med vektoret (h, k, l) , alla udda eller alla jämna

För att lösa uppgiften mer formellt använd strukturfaktor:

$$\vec{R}_{pqj} = \vec{R}_{pq} + \vec{R}_j = \underbrace{p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}}_{\text{gittervektor}} + \underbrace{\vec{R}_j}_{\text{bas}}$$

Diffractionsamplitud:

$$\propto \sum_{\vec{R}_{pqj}} e^{-i\vec{s}\vec{R}_{pqj}} f_j = \underbrace{\sum_{\vec{R}_{pq}} e^{-i\vec{s}\vec{R}_{pq}}}_{\text{gittersumma}} \underbrace{\sum_{\vec{R}_j} e^{-i\vec{s}\vec{R}_j} f_j}_{\text{strukturfaktor}}$$

$\Rightarrow \vec{s}\vec{a} = \vec{G}$

I vårt fall $\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h, k, l)$

$K = (0, 0, 0), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})a, (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})a, (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)a$

$B_{r, Cl} = K + (\frac{1}{2}, 0, 0)a$

$$S = f_K \sum_{\vec{R}_K} e^{-i\vec{G}\vec{R}_K} + f_{Cl} \sum_{\vec{R}_{Cl/B_r}} e^{-i\vec{G}(\vec{R}_K + (\frac{1}{2}, 0, 0)a)}$$

$$= (f_K + f_{Cl/B_r} e^{-i\pi h}) \cdot (1 + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(l+k)})$$

4 om hkl udda eller jämna (alla)
 0 annars

Cl $f_{Cl} = f_K \Rightarrow$

$\Rightarrow S = f_K (1 + e^{-i\pi h}) S_{fcc}$

$S=0$ om h udda

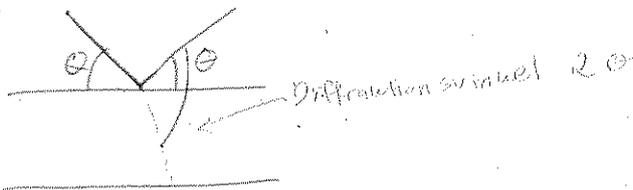
$\Rightarrow S \neq 0$ om alla hkl jämna

Br $f_{Br} \neq f_K \Rightarrow$

\Rightarrow alla udda $(f_{Br} - f_K) \neq 0$

jämna $(f_{Br} + f_K) \neq 0$

D10



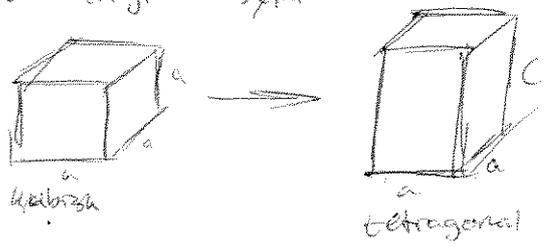
$$\sin \theta = \frac{\lambda}{h^2 + k^2 + l^2}$$

Diffractionsvillkor: $2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$ (Bragg), $\lambda = 1.932 \text{ \AA}$

Höga T: 161.48° (400-plan)

Låga T: $\rightarrow \begin{cases} 161.48^\circ \\ 161.38^\circ \text{ (dubbelt så stark)} \end{cases}$

Uppsplittring av braggreflex motiveras övergång från kristall med lägre symmetri



$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad d_{h00} = d_{0k0} = d_{00l} = \frac{a}{4} \quad (\text{kubisk})$$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{a}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}, \quad d_{h00} = d_{0k0} = \frac{a}{4}, \quad d_{00l} = \frac{c}{4} \quad (\text{tetragonal})$$

Pulverdiffraction \Rightarrow medelvärde över riktningar \Rightarrow

$$d_{h00} = d_{0k0} \text{ dubbelt så vanlig som } d_{00l}$$

Höga T: $\frac{2a}{4} \sin \theta_{400} = \lambda \Rightarrow a = 3.195 \text{ \AA}$

Låga T:

$$\frac{c}{a} = \frac{\sin \theta_{400}}{\sin \theta_{004}} = 1.0026$$

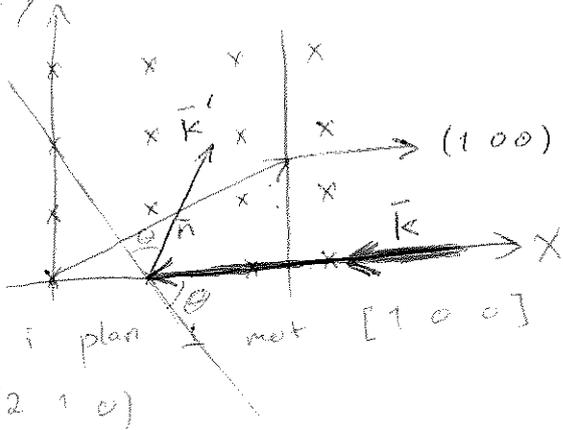
$$V_{\text{höga T}} = a^3$$

\Rightarrow 0.5 minskning i volymen

$$V_{\text{låga T}} = c a^2$$

D14 y

Reella rummet



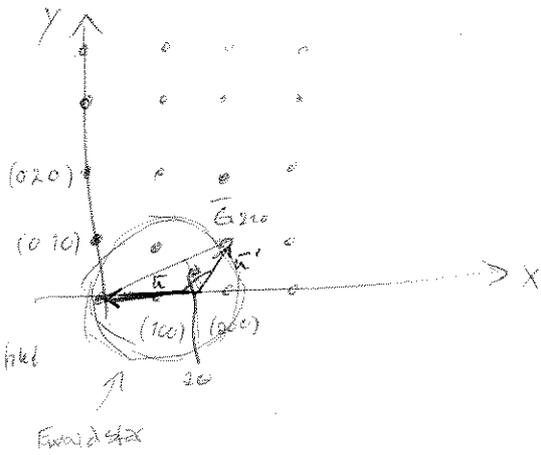
Reflektion mot (210)-plan

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi x}{\lambda}$$

$$2 d_{210} \sin \theta = \lambda \quad (\text{första ordningen})$$

$$d_{210} = \frac{a}{\sqrt{2^2 + 1}} = \frac{a}{\sqrt{5}}$$

Reciproka rummet



$$\text{Läge: } \vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$$

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} (-1, 0, 0)$$

$$\vec{G}_{210} = \frac{2\pi}{a} (2, 1, 0)$$

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}_{210}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

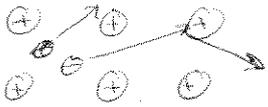
Enklaste beskrivningen av en metall!

6/2-14

Drudemodellen

Elektroner är klassiska partiklar, massa m , laddning $-e$, som bromsas av kollisioner med atomer.

Beräkna konduktivitet σ , ohms lag: $\vec{j} = \sigma \vec{E}$



Kraft ($F = qE$) $-eE$ på varje elektron

Alltså utan kollisioner: $m \frac{dV}{dt} = -eE$

obegränsad acceleration, fel

Inkludera bromsande kraft $-mV/\tau$ (τ : tidsskala)

Utan E -fält: $m \frac{dV}{dt} = -m \frac{V}{\tau} \Rightarrow V = V_0 e^{-t/\tau}$, τ -relaxationstid eller kollisionstid

(tidsskala på hur länge elektronen färdas utan kollision)

Stationärt flöde i E -fält:

Rädda ekv. $m \frac{dV}{dt} = -m \frac{V}{\tau} - eE \Rightarrow V = -\frac{eE\tau}{m}$
= 0 pga stationärt

genomsnittlig hastighet, drift hastighet

Strömmen: $\vec{j} = -enV = \frac{e^2 n \tau}{m} \vec{E}$

$n = \frac{\text{antal } e^-}{\text{volymenhet}}, n \approx 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Driftkonduktiviteten, σ är okänd

Hur är det med $C_V = \frac{dE}{dT}$ (värmekapacitet)

elektron som klassisk partikel

Klassiska partiklar: energi: $E = \frac{1}{2} k_B T \times (\text{antal frihetsgrader}) = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow$

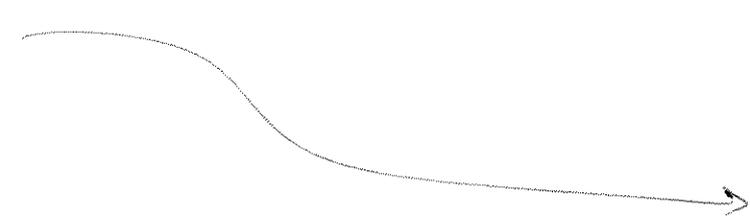
$\Rightarrow C_V = \frac{3}{2} k_B$

Men experimentellt:

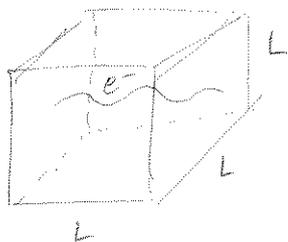
$C_V \approx \gamma T + AT^3$ (låga temp), där $\gamma T \ll k_B$
elektroner från fononer

Lösningen är att elektronerna måste beskrivas kvantmek. som fermioner, dvs. de uppfyller Pauliprincipen (bara en partikel per tillstånd)

Vad är möjliga tillstånd?



Beskriv elektronen som partikel i låda:



$V=L^3$

Schrödingerekv.
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi$ vågfunktion

har lösningen: $\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ med $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

\vec{k} : vågtalet, våglängd
 $\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|}$

Rörelsemängd $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Antag periodiska randvillkor (för att minimera randens betydelse)

dvs $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + L\hat{x}) \Rightarrow e^{ik_x L} = 1 \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L} \cdot n_x$ ($n_x = \pm 1, \pm 2, \dots$)
 (samma för k_y och k_z)

Tillstånd: ges av kvanttal (k_x, k_y, k_z) och spinn \uparrow eller \downarrow

Fermi-Dirac fördelningen

Sannolikhet att ett tillstånd med energi E är besatt:

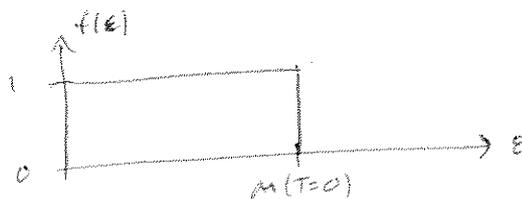
$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$ där μ : kemiskt potential

Antal e^- med vågtalet \vec{k} : $n_{\vec{k}} = \frac{2}{1 + e^{(E_{\vec{k}} - \mu)/k_B T}}$ där $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ \leftarrow pga två spin

Fermi-Dirac: $T=0$, stegfunktion

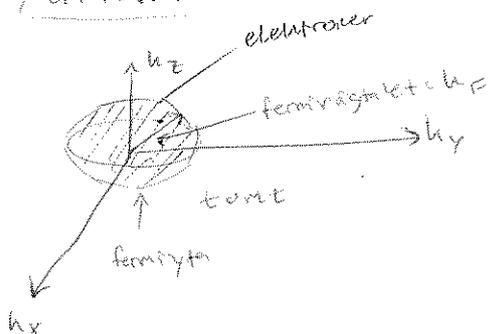
Fermienergi $E_F = \mu(T=0)$

Vid $T=0$: alla tillstånd med $E < E_F$ är fulla
 $E > E_F$ är tomma



Fermistår

$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



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

Beräkna fermienergin = E_F

ges av, $N = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \stackrel{T=0}{=} 2 \sum_{k < k_F} 1 = \left[\begin{array}{l} \text{skriv om} \\ \text{som integral med} \\ \text{hjälp av tillståndstäthet; } \Delta k_x = \frac{2\pi}{L}, \text{ } 1 = \frac{L}{2\pi} \cdot \Delta k_x \end{array} \right]$

(antal elektroner $N \sim 10^{23}$)

$= 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \cdot \frac{1}{3} k_F^3 \Rightarrow$

$\int_{k < k_F} d^3k$ högst sidos

$\Rightarrow k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad n = \frac{N}{V} = \text{elektronstäthet}$

$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ är typiskt för metaller $E_F \sim 5-10 \text{ eV}$

motsvarar $T_F = E_F / k_B \sim 10^4 \text{ K}$
 ↑
 fermitemp

$T_F \gg T$ gör att temperaturen påverkar endast elektroner nära fermiytan.

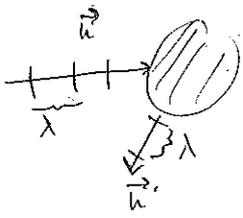


$\Delta E \sim \frac{\text{antal } e^-}{T/T_F} \times k_B T \sim \frac{T}{T_F} k_B \Rightarrow C_V \sim \frac{T}{T_F} k_B \ll k_B$

Rättnings

16/2-14

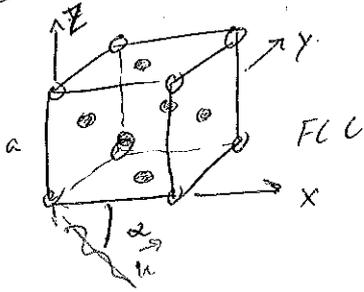
Röntgen diffraction



elastic process:
 $\lambda = \lambda' \Rightarrow |\vec{h}| = |\vec{h}'|$, $\vec{G}_{hkl} = \vec{h}' - \vec{h}$

$\lambda \leq a$, $h = \frac{2\pi}{\lambda}$

DIG

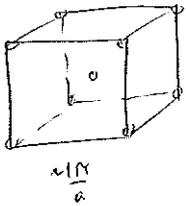


infallande ljus i (x,z)-plan, (0,1,0) planet
 normalvektor $\hat{n} = (0,1,0)$

FCC: Alla (h,k,l) udda eller jämna

$\vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a} (h,k,l)$

Reproduktionsmet



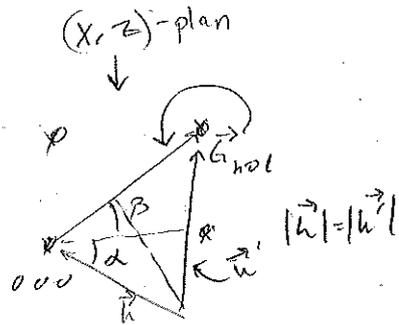
BCC

\vec{G} i (0,1,0)-planet $\Rightarrow h = 0$

~~W~~ $h = 0 \Rightarrow (h,k,l)$ jämna heltal

Utifrån figur: $h \cos(\alpha + \beta) = \frac{|\vec{G}_{hkl}|}{2}$

$= \frac{1}{2} \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + l^2} \Rightarrow \sqrt{h^2 + l^2} = (2 \frac{a}{\lambda})^2 \cos^2(\alpha + \beta)$



Undersök $(h,k,l) = (2,0,0), (0,0,2), (2,0,2)$

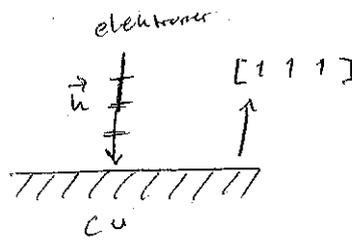
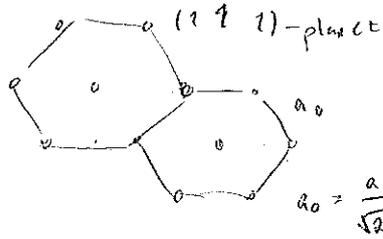
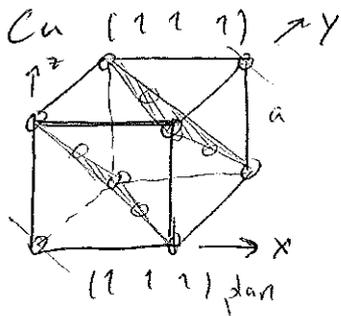
$l = 0 \Rightarrow \beta = 0 \Rightarrow h^2 = 25 \Rightarrow h = 5$, ej möjligt (ej jämnt)

$h = 0 \Rightarrow \beta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow h^2 + l^2 = 1 \Rightarrow l = 1$

$\left. \begin{matrix} h = 2 \\ l = 2 \end{matrix} \right\} \Rightarrow \beta = \frac{\pi}{4} \Rightarrow h^2 + l^2 = 8 \Rightarrow h = l = 2$ OK

Svar (2,0,2)

D23 Elektron diffraction



$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, minsta E , dvs minsta k

Lågenergetiska e^- sprids bara mot ytlagret

Enligt uppgift D2 reciprokt gitter

$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0\sqrt{3}} (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})$

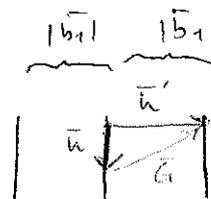
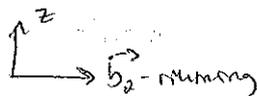
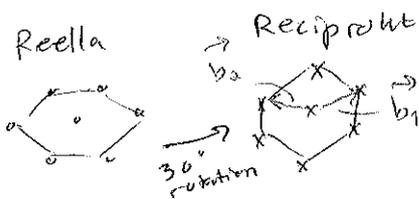
$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0\sqrt{3}} (-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})$ ← pga medellera ett lager

$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \hat{z}$ (låt $c \rightarrow \infty$)

Endast ett yt-plan, låt planavståndet $c \rightarrow \infty$, då $|\vec{b}_3| \rightarrow 0$

Reciproka punkter i $[001]$ -rättning som ligger oändligt tätt \Rightarrow

Stavar i \hat{z} -led

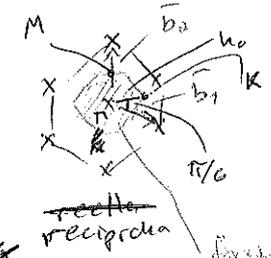
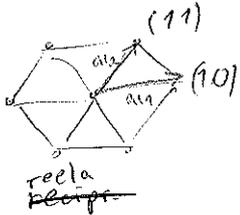


Kortaste väglängden är $|b_1|$ lång

$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2m} |b_1|^2 = \frac{16}{3} \frac{\pi^2}{m} \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \approx 37 \text{ eV}$

V2) Tötpechiet

lager, [1 1 1]-richtung : FCC



$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0 \right) \quad \Gamma = (0, 0, 0)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} (0, 1, 0)$$

~~reelle rezip~~

~~reelle rezip~~ fürste BZ

K: $h_0 \cos \frac{\pi}{6} = \left| \frac{1}{2} \vec{b}_1 \right| \Rightarrow K: \frac{4\pi}{3a} (1, 0, 0)$

M: $\frac{2\pi}{a\sqrt{3}} (0, 1, 0)$

Gitterparameter: $\vec{r}_{nm} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$

Transversell vibration (\perp mit y tan)

Amplitud: $e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r}_{nm} - \omega t)}$
 $u_{nm} = u e$

$F = ma$

$m \ddot{u}_{00} = \sum_{nm} C [u_{nm} - u_{00}] \Rightarrow -\omega^2 m u = C (u_{10} + u_{01} + u_{11} + u_{-10} + u_{0-1} + u_{-1-1} - 6u_{00})$

\uparrow Kraftkonstant

$\vec{r}_{nm} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$

$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{+i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} = 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1)$

$\Rightarrow \omega^2 = 2\omega_0^2 (3 - \cosh \vec{k} \cdot \vec{a}_1 - \cosh \vec{k} \cdot \vec{a}_2 - \cosh \vec{k} \cdot \vec{a}_3)$

$\omega_0^2 = \frac{C}{M}$

$\vec{a}_3 = \vec{a}_1 - \vec{a}_2$

M-punkten: $\vec{k}_M = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} (0, 1, 0)$

$\omega^2 = 2\omega_0^2 (3 - 1 - (-1) - (-1)) = 8\omega_0^2$

$\omega_M = \sqrt{8} \omega_0$

R-punkten: $\vec{k}_R = \frac{4\pi}{3a} (1, 0, 0)$

$\omega^2 = 2\omega_0^2 (3 - (-\frac{1}{2}) - (-\frac{1}{2}) - (-\frac{1}{2})) = 9\omega_0^2$

$\omega_R = 3\omega_0$

Små h (nära Γ -punkten)

$$\cos \vec{h} \cdot \vec{a}_i \approx 1 - \frac{(\vec{h} \cdot \vec{a}_i)^2}{2}$$

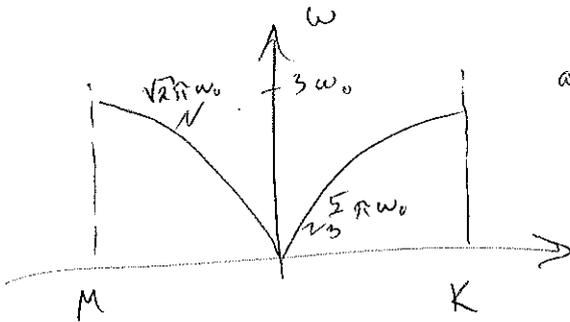
$$\vec{h} = h \hat{h}$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \omega_0^2 \sum_{i=1}^3 (\vec{h} \cdot \vec{a}_i)^2 = \omega_0^2 \sum_{i=1}^3 (\hat{h} \cdot \vec{a}_i)^2 \cdot h^2$$

$\omega \sim h$

$$\Gamma \rightarrow M: \xi = \frac{h}{h_M} \Rightarrow \omega^2 = 2 \omega_0^2 \pi^2 \xi^2 \quad \boxed{\omega_{PM} = \sqrt{2} \pi \omega_0 \xi}$$

$$\Gamma \rightarrow K: \xi = \frac{h}{h_K} \Rightarrow \omega_{PK} = \frac{5}{3} \pi \omega_0 \xi$$



aktiva moder ($\omega \sim h$)

$$\boxed{\omega_m = \sqrt{8} \omega_c}$$

(Dugga på kapitel 1-6)

10/2-14

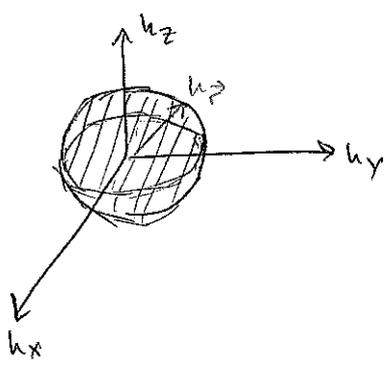
Elektrongas av ledningselektroner

En-elektronmodellen: $\psi_{\vec{h}}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}$ med energi $\epsilon_{\vec{h}} = \frac{\hbar^2 h^2}{2m}$, $h = |\vec{h}|$

Fermisfären

Fermivärdet: $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ n : elektrontäthet

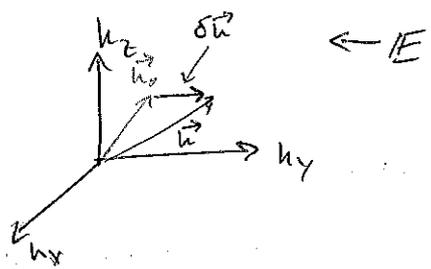
Fermienergin: $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$
($\mu(T=0)$)



Konduktivit

Kraft $\vec{F} = -e\vec{E}$ på varje elektron. $\left(\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} \Leftrightarrow \hbar \frac{d\vec{h}}{dt} = \vec{F} \right)$

Försvära på ändringen i värdet $\delta\vec{h} \approx \vec{h} = \vec{h}_0 + \delta\vec{h}$



Om τ stänger av kraften återgår elektronen till värdet \vec{h}_0 , över tidskala τ (relaxationstid/kollisionsstid) (p.s.s. som för drudemodellen)

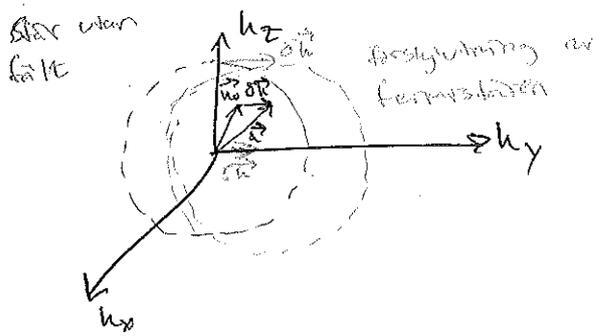
$$\Rightarrow \hbar \frac{d\delta\vec{h}}{dt} = \hbar \frac{\delta\vec{h}}{\tau} - e\vec{E}$$

Var kommer τ ifrån?

- Kollisioner med fononer
- Oregelbundenheter i gitteret
- Elektron-elektron kollisioner

Stationärt flöde: $\frac{d\delta\vec{h}}{dt} = 0 \Rightarrow \delta\vec{h} = -\frac{1}{\hbar} e\tau\vec{E}$

Stationär förskjutning av värdet för alla elektroner



nettoflöde av elektroner \Rightarrow drift hastighet: $\vec{v}_{drift} = \frac{\delta\vec{p}}{m} = \hbar \frac{\delta\vec{h}}{m} = -\frac{e\tau}{m} \vec{E}$
(samma som för drudemodellen)

Ohm's lag, $\vec{j} = \sigma \vec{E}$, där $\vec{j} = -ne \vec{v}_{drift}$

$\Rightarrow \sigma = \frac{ne^2 \tau}{m}$ konduktivitet, $\rho = \frac{m}{ne^2 \tau}$ resistivitet

OBS! \vec{v}_{drift} är inte verkliga hastigheten för en elektron

Verkliga hastigheten: $\vec{v} = \hbar \frac{\vec{k}}{m} = \{ \tau a \times \hbar k_F \} = \text{några } \text{Å}^{-1}$ för en metall

$\Rightarrow \frac{v}{c} = \frac{\hbar c}{mc^2} k_F \approx 10^{-3} \Rightarrow v \approx 10^5 \text{ m/s}$
 (hastighet)

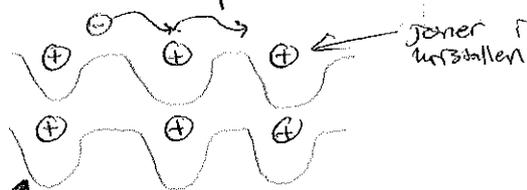
Elektroner i periodisk potential (kap 7)

Freielektronmodellen \Rightarrow metall, \vec{E} -fält \Rightarrow ström

Isolator? \vec{E} -fält \nrightarrow ström, $\sigma = 0$ ($T=0$)

Freielektronmodellen kan inte beskriva en isolator.

Vi behandlar periodisk potential.



Potential $U(\vec{r})$, är periodisk dvs.
 $U(\vec{r} + \vec{T}) = U(\vec{r})$ där $\vec{T} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3$
 är en gittervektor

↑
vägse potential
mellan jonerna

Fourierutveckling $U(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ om $U(\vec{r} + \vec{T}) = U(\vec{r}) \Rightarrow$

$\Rightarrow e^{i\vec{q}\cdot\vec{T}} = 1$ dvs. $\vec{q}\cdot\vec{T} = 2\pi \cdot \text{heltal}$, \vec{q} är en reciprok gittervektor (\vec{G}_{recip})

$\Rightarrow U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$

↑
summa över
alla möjliga
gittervektorer

Schrodinger ekvationen:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

med $U=0$ har vi lösningar $\psi \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Vad gör $U \neq 0$?

Testa att verha ~~med~~ med $U(\vec{r})$ på $e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}$

$$U(\vec{r}) e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i(\vec{h}+\vec{G})\cdot\vec{r}}$$

summa (linjer superpos.)

av planvåg med väktal $\vec{h}+\vec{G}$ för alla $\vec{G} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$

Lösningar till $H\psi = E\psi$ blir på formen;

$$\psi_{\vec{h}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} a_{\vec{h}+\vec{G}} e^{i(\vec{h}+\vec{G})\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{G}} a_{\vec{h}+\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} = \underbrace{e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}}_{\text{periodisk med gitter}} \underbrace{e_{\vec{h}}(\vec{r})}_{\substack{\text{periodisk} \\ e_{\vec{h}}(\vec{r}+\vec{T}) = e_{\vec{h}}(\vec{r})}}$$

Bloch's theorem

Egenfunktionerna till SE i en periodisk potential är på

formen planvåg ($e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}$)

• funktion med samma periodicitet som gitteret

Energiband

S.E. på $\psi_{\vec{h}}(\vec{r}) = e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{G}} a_{\vec{h}+\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$

$$H\psi_{\vec{h}}(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \right] \sum_{\vec{G}'} a_{\vec{h}+\vec{G}'} e^{i\vec{G}'\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{G}'} a_{\vec{h}+\vec{G}'} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{h}+\vec{G}')^2 e^{i(\vec{h}+\vec{G}')\cdot\vec{r}} + \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i(\vec{h}+\vec{G}'+\vec{G})\cdot\vec{r}} \right] = E \psi_{\vec{h}}(\vec{r}) = E \sum_{\vec{G}'} a_{\vec{h}+\vec{G}'} e^{i(\vec{h}+\vec{G}')\cdot\vec{r}}$$

hur lösa denna?

Planvågorna är ortogonala (planvågor: $e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}$ och $e^{i\vec{h}'\cdot\vec{r}}$) för $\vec{h} \neq \vec{h}'$
 $(\int d^3r e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{h}'\cdot\vec{r}} \sim \delta(\vec{h}-\vec{h}'))$

Vi identifierar koef. för varje planvåg.

t.ex. $e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}}$: $a_{\vec{h}+\vec{0}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} h^2 \right) + \sum_{\vec{G}} a_{\vec{h}-\vec{G}} U_{\vec{G}} = \sum_{\vec{G}} a_{\vec{h}+\vec{G}}$

∴ får en uppsättning sådana ekvationer

Homogent linjärt ekv-system för koef. $a_{\vec{h}+\vec{G}}$, alla \vec{G}

Skriv som en matris

$$\underbrace{\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2 h^2}{2m} - E & U_{G_{100}} & U_{G_{200}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{bmatrix}}_M \begin{bmatrix} a_{\vec{h}+\vec{0}} \\ a_{\vec{h}+\vec{G}_{100}} \\ a_{\vec{h}+\vec{G}_{200}} \\ \vdots \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

Att lösa sådana att $\det M = 0$
(annars finns invers $M^{-1} \Rightarrow M^{-1}M \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = M^{-1}0$, triviala lösningar) \Rightarrow

\Rightarrow Ger en uppsättning egenvärden $\epsilon_{\vec{u},n}$, $n=1,2,3,\dots$ där $\epsilon_{\vec{u},1} < \epsilon_{\vec{u},2}$
och egenvektorer $\Psi_{\vec{u},n}$

n väljas för bandbredd

• Lösningar: $\Psi_{\vec{u},n}: H \Psi_{\vec{u},n} = \epsilon_{\vec{u},n} \Psi_{\vec{u},n}$

OBS! Vågfunktionen har kvanttal \vec{u} och n , \vec{u} ligger i första BZ,
väljas gittervektor

Tillståndstäthet

Vill summera över energiegentillstånd ψ_i med energi E_i ,

t.ex. partitionfunktion $Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T}$

medelenergin $U = \sum_i E_i n_i = \sum_i E_i n(E_i)$

Macroscopiskt system

Energivärna ligger tätt \Rightarrow Kan approximera summan med integral

$$\sum_i f(E_i) \approx \int dE N(E) f(E)$$

$N(E)$ definieras så att $N(E)dE =$ antalet tillstånd i intervallet $[E, E+dE]$

E1 Tillståndstäthet i elektrongasen

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, vet tillståndstäthet i k -rummet $\vec{k} = \left(\frac{n_1}{L_1}, \frac{n_2}{L_2}, \frac{n_3}{L_3} \right) 2\pi$

$N(k) = \frac{L}{2\pi}$ per dimension

3D: I k -rummet: $2 N_{3D}(k) d^3k = N(E)dE$

- Antal tillstånd i kub: $[k_x, k_x + dk_x]$
 $[k_y, k_y + dk_y]$
 $[k_z, k_z + dk_z]$

Sfärisk symmetri: Volymselementet sfärskut skal med tjocklek dk

 $d^3k = 4\pi k^2 dk$, $N_{3D} = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 = \frac{V}{(2\pi)^3}$

$\frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = N(E)dE$, $N(E) = \frac{V k^2}{4\pi^2 \left(\frac{dE}{dk} \right)}$, $\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k$

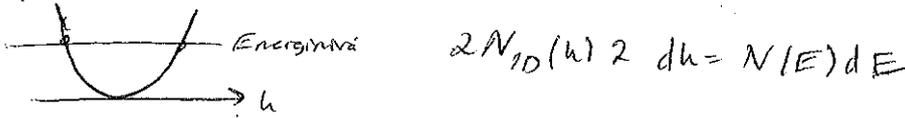
$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $N(E) = \frac{V k^2}{\pi^2 \left(\frac{dE}{dk} \right)} = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m^3 E} = C_3 \sqrt{E}$

2D: $2 N_{2D}(h) d^2h = N(E) dE$

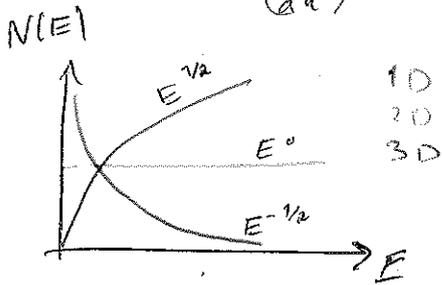
$N_{2D} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 = \frac{A}{(2\pi)^2}$, cirkulär ring med radie h och tjockleken dh

 $d^2h = 2\pi h dh$, $N(E) = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} = \frac{2\pi h}{dE} = \frac{A}{\pi} \frac{h}{\left(\frac{\hbar^2 h}{m}\right)} = A \frac{m}{\pi \hbar^2} = C_2 E^0$

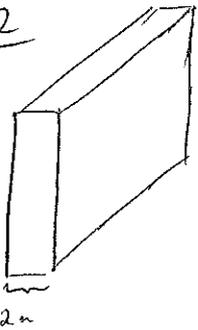
1D:



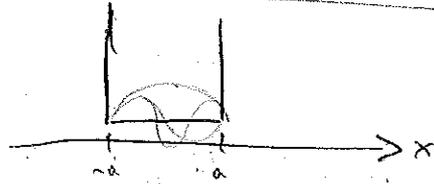
$N(E) = \frac{L}{2\pi} \frac{4}{\left(\frac{dE}{dh}\right)} = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} = C_1 E^{-1/2}$



E2



$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$

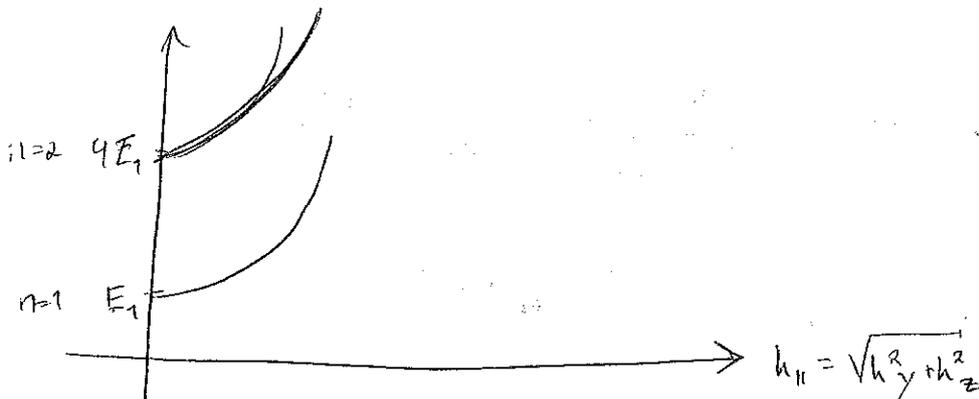


$\Rightarrow \Psi(x=a, y, z) = \Psi(x=-a, y, z) = 0$

S.E: $-\frac{\nabla^2}{2m} \Psi + V\Psi = E\Psi$, $\Psi(\vec{x}) = e^{i(k_y y + k_z z)} \sin(k_x(x+a))$

$\Psi(x=a) = 0$, $\sin(k_x a) = 0 \Rightarrow k_x = \frac{\pi}{2a} n$ $n=1, 2, \dots$

$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + k_z^2 + \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 n^2)$



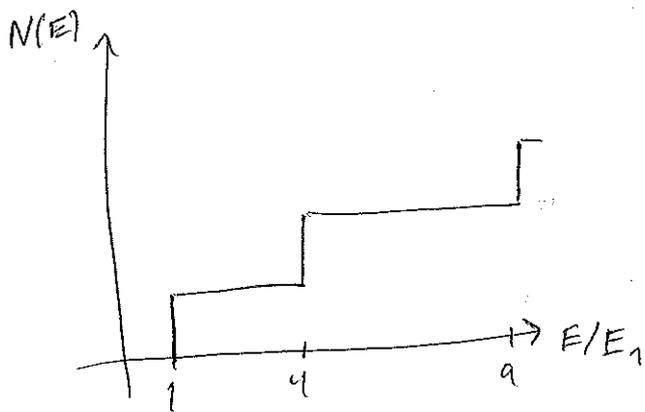
$E_1 = \left(\frac{\hbar \pi}{2a}\right)^2 \frac{1}{2m}$
 $a \approx 2 \text{ \AA}$

$E_1 \approx 2.3 \text{ eV}$

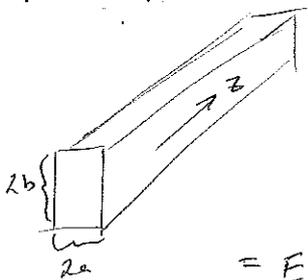
Tillståndstäthet: Värde direkt

Δ -Tillstånd ger bidrag

$\frac{A_m}{\pi h^2}$ ← arean på systemet man har



Kvanttråd

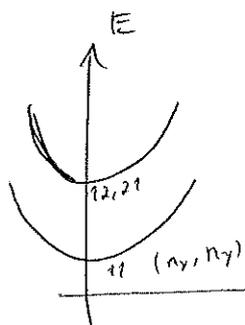


$$\psi(x=\pm a) = 0 \quad \psi = \sin(k_x(x+a)) \sin(k_y(y+b)) e^{ik_z z}$$

$$\psi(y=\pm b) = 0$$

$$k_x = \frac{\pi}{2a} n_x, \quad k_y = \frac{\pi}{2b} n_y, \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x \pi}{2a} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{2b} \right)^2 + \left(\frac{\hbar k_z}{\hbar} \right)^2 \right] =$$

$$= E_{n_x, n_y}(k_z)$$

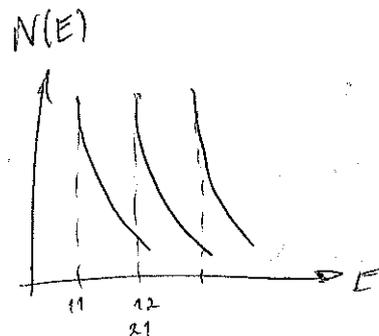


$$E_a = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2, \quad E_{11} = E_a + E_b + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

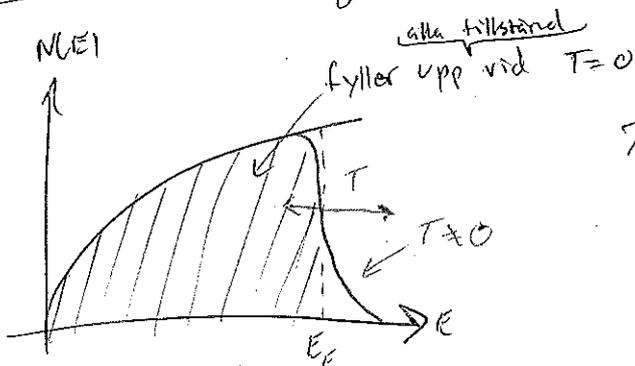
$$E_b = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2b} \right)^2$$

$$E_{12} = E_a + 4E_b + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$E_{21} = 4E_a + E_b + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$



E3 3D elektrongas vid $T=0$, $N(E) = C_3 \sqrt{E}$



Totala antalet elektroner

$$N = \sum_{\substack{i \\ \text{fyllda} \\ \text{tillstånd}}} = \int_0^{E_F} dE N(E) = C_3 \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = C_3 \frac{2}{3} E_F^{3/2}$$

Totala kinetiska energin

$$U = \sum_{i \text{ fyllda}} E_i = \int_0^{E_F} dE N(E) E = C_3 \int_0^{E_F} E^{3/2} dE = C_3 \frac{2}{5} E_F^{5/2}$$

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} E_F \Rightarrow U = \frac{3}{5} N E_F \quad (\text{vid } T=0)$$

ES Al, fcc med $a = 4,05 \text{ \AA}$, 3 valenselektroner

$$\Rightarrow \text{Elektron\rho{t}thet } n = \frac{N}{V} = 4 \cdot \frac{3}{a^3} \approx 1,81 \cdot 10^{29} \text{ m}^{-3}$$

↑
atomer
i enhetscellen

Avst\u00e5nd mellan energiniv\u00e5er vid $E = E_F$: $\frac{1}{N(E_F)}$

$$N(E_F) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m^3} \sqrt{E_F}, \quad N = \int_0^{E_F} dE N(E) = \frac{2}{3} E_F N(E_F) \Rightarrow$$

fr\u00e5n uppg.

E1

$$\Rightarrow \frac{1}{N(E_F)} = \frac{2}{3} \frac{E_F}{N} \frac{V}{V} = \frac{2}{3} \frac{E_F}{n} \frac{1}{V}, \quad E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad k_F^2 = (3\pi^2 n)^{2/3} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_F = 1,87 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\frac{1}{N(E_F)} = 4,3 \cdot 10^{-29} \frac{\text{eV}}{\text{V}[\text{m}^3]}$$

a) $V = 10 \text{ cm}^3 = 10^{-5} \text{ m}^3 \Rightarrow \Delta E = 4,3 \cdot 10^{-24} \text{ eV}$

b) $V = 10 \text{ \mu m}^3 = 10^{-17} \text{ m}^3 \Rightarrow \Delta E = 4,3 \cdot 10^{-12} \text{ eV}$

c) $V = 100 \text{ \AA}^3 = 10^{-28} \text{ m}^3 \Rightarrow \Delta E = 0,43 \text{ eV}$

Bandstruktur

17/2-14

Sammanfattning från förra föreläsning.

Elektroner i periodisk pot.

Fria elektronmodell

- vägelektron \hbar
- spin

Periodisk pot

- gittervägta $\vec{h} \leftarrow \Gamma$ första BZ
- bandindex $n=1, 2, 3, \dots$
- spin

Blochs teorem

Vågfunktion $\psi_{\vec{h},n}(\vec{r}) = e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} \psi_{\vec{h},n}(\vec{r})$ ← samma period som gittret

Tomma gittermodellen

Antag att potentialen $V(\vec{r})$ är liten ($\ll 0$) \Rightarrow då är energerna

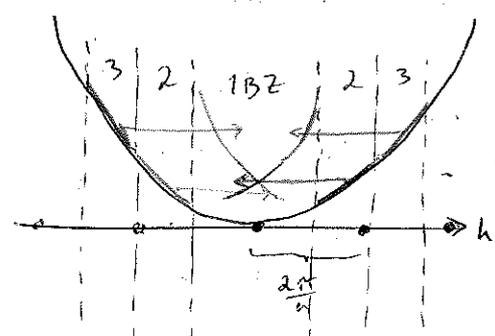
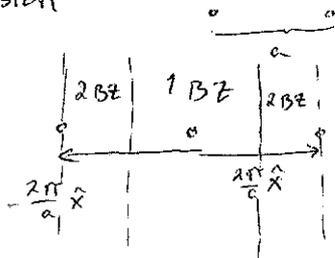
$E_{\vec{h},n}$ = energi för fria elektroner dvs $\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{h} + \vec{G})^2$

- Ett sätt att upphäva bandstruktur
- Kan finnas för vissa enkla metaller

Ex En dimension

reciprok gitter med $\vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \text{heltal } \hat{x}$

BZ

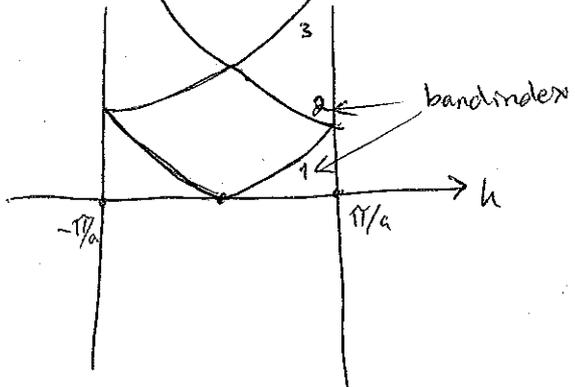


$G = -\frac{2\pi}{a} \hat{x}$
 $G = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$
 $G = \pm \frac{2\pi}{a} \hat{x}$

Utgå från fria parabolerna

Flytta in tillstånd utanför första BZ
 in i första BZ m.h.a. reciproka gittervektor

Rita nu ut det som finns i första BZ



Lägg till svag potential $U > 0$, $U \ll \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$
 karakteristisk energi

Spelar bara roll om två energier är nästan samma

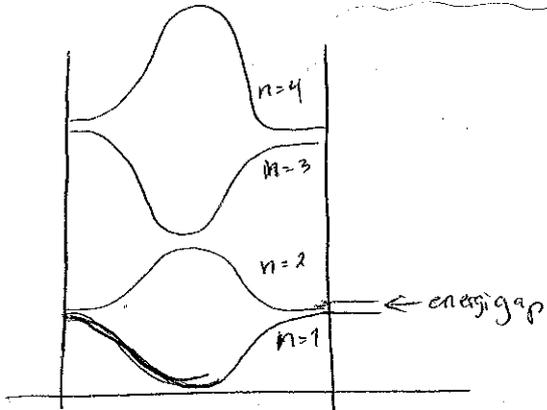
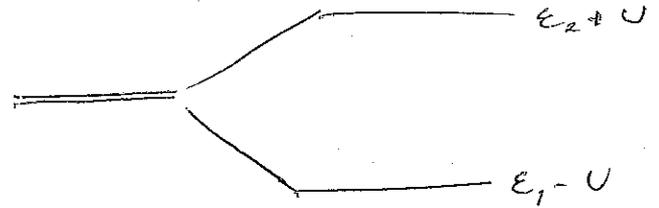
$E_2 \approx E_1 \Rightarrow$ Nya energier genom att lösa

$$\begin{bmatrix} E_1 - E & U \\ U & E_2 - E \end{bmatrix} \Rightarrow \det \begin{vmatrix} & \\ & \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \text{nya energier } E \Rightarrow$$

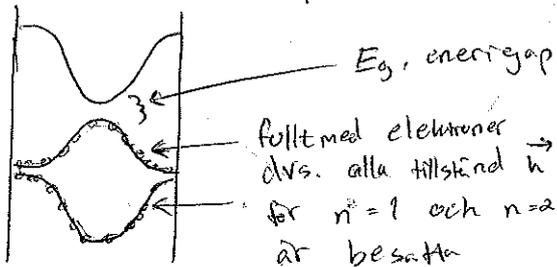
$$= (E_1 - E)(E_2 - E) - U^2 = 0 \xrightarrow{\text{antag } E_1 \approx E_2} E_1^2 - 2EE_1 + E^2 - U^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E = E_1 \pm \sqrt{E_1^2 + (U^2 - E_1^2)} = E_1 \pm U \Rightarrow$$

\Rightarrow bandstruktur, nästan fri elektronmodell



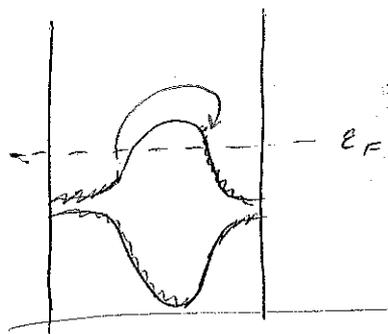
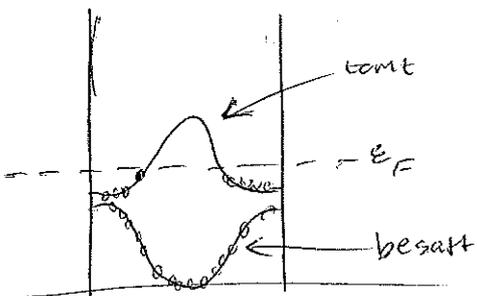
Isolator, har fyllda band



E_g , energigap, gör att elektronerna inte påverkas av ett svagt fält
 fullt med elektroner dvs. alla tillstånd n för $n=1$ och $n=2$ är besatta

Metall, band som ~~inte~~ är fyllda

med \vec{E} -fält åt vänster:



fler elektroner med $+k$ än med $-k \Rightarrow$
~~ström~~
 \Rightarrow ström

Halvledare, Isolator med litet gap

Antal tillstånd i ett band

Ett band: har ett tillstånd för \vec{k} -tillstånd i första BZ x2 för spin

Antal tillstånd: 1 BZ: $N_{BZ} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot V_{BZ}$ ← volym i k-rummet

↑ tillståndstäthet i k-rummet

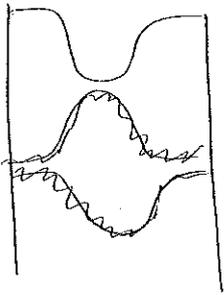
$$V_{BZ} = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = [\text{här visas generellt}] = \frac{(2\pi)^3}{V_{cell}} \leftarrow \text{primitiva cellen} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow N_{BZ} = \frac{V}{V_{cell}} = N_{cell} \quad \text{antal primitiva celler} \Rightarrow$$

\Rightarrow I ett band får det plats $2N_{cell}$ elektroner \Rightarrow

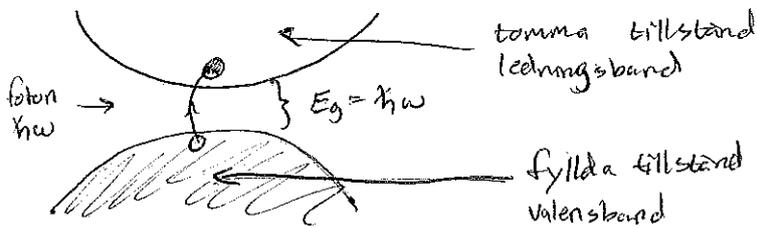
\Rightarrow för isolator krävs ett jämnt antal ~~elektroner/cell~~ elektroner/cell

Ex En dimension, antag 4 elektroner/atom



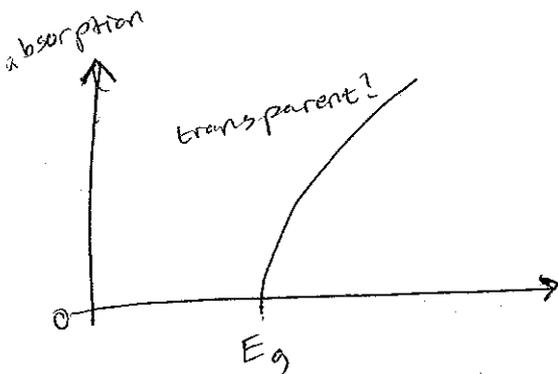
2 st/band ($2e^-$ per band?)
isolator

Hur kan man se bandgapet för en isolator?



Om $h\omega > E_g$ kan ljus absorberas
 $h\omega < E_g$ —||— e^- absorberas

Är ljuset påverkat för $h\omega < E_g$?
Nej! Brytningsindex



Elektromagnetisk respons

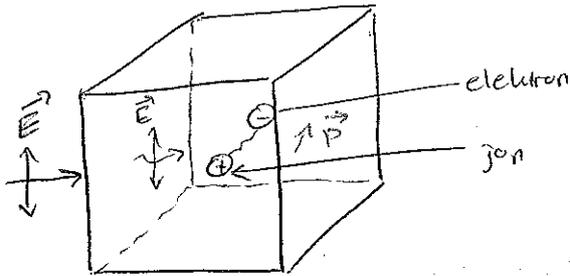
AC-fält, $\vec{E} \sim e^{-i\omega t}$

Förenklad beskrivning: Vågelikvationen för ljus (från Maxwell)

$$\nabla^2 \vec{E} - \left(\frac{n}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{inga strömmar}), \quad n = \text{brytningsindex}, \quad n = \sqrt{\epsilon_r}$$

$\epsilon_r = \text{dielektricitetsfunktion (relativ)}, \quad v = \text{ljushastighet} = \frac{c}{n}$

ϵ_r ? Från polarisation av materialet



Fältet \Rightarrow oscillerande elektrisk dipol \Rightarrow fält

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$$

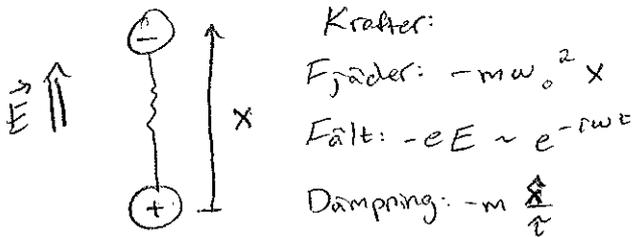
← elektrisk susceptibilitet

$$\epsilon_r = 1 + \chi_e$$

Modell för att beräkna \vec{P} , givet \vec{E} :

$$\vec{P} = n \vec{p} \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{dipolmoment för en elektron} \\ \text{elektrontäthet} \end{array}$$

Dipolmoment: $x \begin{cases} (-) \\ (+) \end{cases} \quad \vec{p} = -e x \hat{x}$



Krafter:

Fjäder: $-m\omega_0^2 x$

Fält: $-eE \sim e^{-i\omega t}$

Dämpning: $-m \frac{dx}{dt}$

RE: $m\ddot{x} = -m\omega_0^2 x - m \frac{dx}{dt} - eE$, lösning $x \sim e^{-i\omega t}$, samma frekvens som

fältet \Rightarrow

$$\Rightarrow -m\omega^2 x = -m\omega_0^2 x + i\omega m \frac{dx}{dt} - eE, \quad x = \frac{-eE}{-m(\omega^2 - \omega_0^2 + i\frac{\omega}{\tau})} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \vec{p} = -ex = \frac{e^2 E}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\frac{\omega}{\tau})} \Rightarrow \left\{ \vec{P} = n\vec{p} \quad \text{och} \quad \epsilon_r = 1 + \frac{\vec{P}}{\epsilon_0 \vec{E}} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \epsilon_r = 1 + \frac{ne^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\frac{\omega}{\tau})\epsilon_0}$$

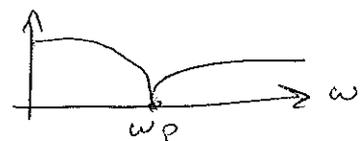
Isolator: gäller $\omega_0 > \omega$, om $\gamma = \frac{1}{\tau}$ liten $\Rightarrow \epsilon_r \approx 1 + \frac{ne^2}{m\epsilon_0\omega_0^2} \geq 1$, dvs. $n = \sqrt{\epsilon_r} \geq 1$

metall: laddningar obundna $\omega_0 \approx 0$, $\gamma = \frac{1}{\tau}$ liten

$$\epsilon_r \approx 1 - \frac{ne^2}{m\epsilon_0\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}} \quad (\text{plasmafrekvensen})$$

$\omega < \omega_p$: $\epsilon_r < 0 \Rightarrow n = \sqrt{\epsilon_r}$ Gimaginär

$\omega > \omega_p$: $\epsilon_r > 0 \Rightarrow n \in \text{Reell}$



Räknövnig

E11 Plasmonenergi $\hbar\omega_p$ för Al

Drude modellen $\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}}$ τ - relaxations tid

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\tau\omega(\omega^2 + \tau^{-2})}$$

Antag rent material (stort τ pga mindre krockar): $\tau \gg \omega^{-1}$

$$\epsilon_1 \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \Rightarrow 1 - \epsilon_1(\omega) \approx \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \leftarrow \text{plotta dessa}$$

Läs av lutning (i plot) ~~skall~~ $\Rightarrow \omega_p \approx 12,2 \text{ eV}$

Rent material: $\epsilon_2 \approx \frac{\omega_p^2}{\tau\omega}$

E13 Na, $E_F = 3,2 \text{ eV}$

Termisk massa nära elektronmassan

Debye-temp, $T_D \approx 160 \text{ K}$

Bidrag från elektronerna till C_V vid $T = 300 \text{ K}$

Fononer: (bidrag)

Hoga temperaturer $T \gg T_D$

Dulong-Petit $C_{vib} = 3 \cdot 2 \cdot N \frac{k_B}{2} = 3Nk_B$

Elektronbidrag:

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{3} k_B N(E_F) k_B T, N = \int_0^{E_F} dE N(E) = \{N(E_F) = C \sqrt{E}\} =$$

$$= C E_F^{3/2} \frac{2}{3} \Rightarrow C = \frac{3N}{2 E_F^{3/2}} \Rightarrow N(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}$$

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{3} k_B \frac{3}{2} \frac{N}{E_F} k_B T = 3Nk_B \frac{\pi^2}{6} \frac{k_B T}{E_F}$$

$$\frac{C_{el}}{C_{vib}} = \frac{\pi^2}{6} \frac{k_B T \leftarrow 26 \text{ meV}}{E_F \leftarrow 3,2 \text{ eV}} = 0,013$$

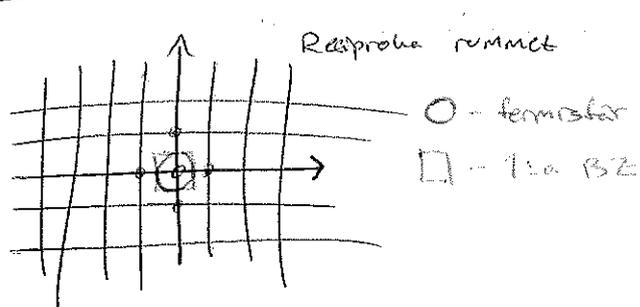
$$\frac{C_{el}}{C_{tot}} = \frac{C_{el}}{C_{el} + C_{vib}} \approx 0,013$$

Termisk massa: $N(E) = \frac{V}{\pi^2} \frac{\sqrt{2m^3}}{\hbar^3} \sqrt{E}$, $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \Rightarrow$

$\Rightarrow N(E_F) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^2} m \hbar k_F$, $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, $N(E_F) \propto m$

$C_{el} = \gamma T = \gamma_0 \frac{m}{m_0} T$, definerar termisk massa

EF1 Trä dimensioner



$k_F = \frac{1}{2} |\vec{G}_{min}|$

• BCC: $\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h, k, l)$ med $h+k+l$ jämnt tal

• FCC: h, k, l alla udda eller alla jämna

$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, $n = \frac{N_{tot}}{V_{tot}} = \frac{N_{el/cell}}{V_{cell}} = \frac{N_{atom/cell} N_{el/atom}}{V_{cell}} \Rightarrow$

$\nwarrow a^3$

$\Rightarrow k_F = \frac{1}{2} |\vec{G}| \Rightarrow$

$\Rightarrow \frac{3\pi^2 N_{el/atom} N_{atom/cell}}{a^3} = \left(\frac{\pi}{a}\right)^3 (h^2 + k^2 + l^2)^{3/2} \Rightarrow$

$N_{el/atom} = \frac{\pi}{3} \frac{1}{N_{atom/cell}} (h^2 + k^2 + l^2)^{3/2}$

• BCC: $N_{atom/cell} = 2$ $(h, k, l) = (1, 1, 0) \leftarrow$ kortast
 $(2, 0, 0)$

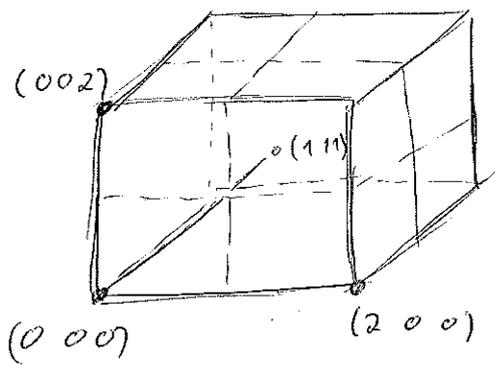
$N_{el/atom} = \frac{\pi}{3} \sqrt{2} = 1,48$

• FCC: $N_{atom/cell} = 4$ $(h, k, l) = (1, 1, 1) \leftarrow$ kortast
 $(2, 0, 0)$

$N_{el/atom} = \frac{\pi}{3} \frac{1}{4} 3^{3/2} = 1,36$

EF2 Tomt gitter

Rita upp ftelektronband i reducerade zonens [111]-riktning i fcc-kristall



SC $\frac{2\pi}{a} (h, k, l) = \vec{G}_{hkl}$ h, k, l alla udda/
alla jämna

Längs med (111) kan vi skriva

$\vec{h} = \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1) \frac{1}{2} x$ $x \in [0, 1]$

$x=0 \Rightarrow \vec{h}=0 \Rightarrow \Gamma$ -punkten

$x=1 \Rightarrow \vec{h} = \frac{\pi}{a} (1, 1, 1) \Rightarrow L$ -punkt

Flytta in alla tillstånd i första BZ

Fria spelmatt ~~.....~~ $\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{h}|^2$

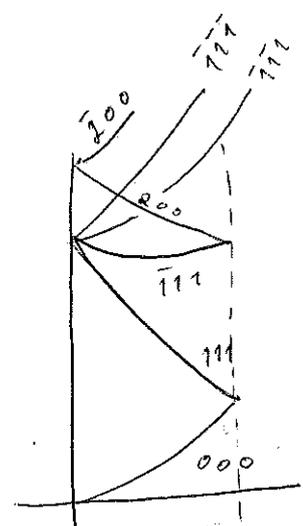
$E_{\vec{h}, \vec{G}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{h} - \vec{G})^2$, $\vec{h} \in 1BZ$

$\vec{G} = 0$, $E = \frac{\hbar^2 h^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 3x^2$

Energiskala $E_0(x=1) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \cdot 3$

$E_{\vec{h}, \vec{u}(x), \vec{G}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 [(x-2h)^2 + (x-2k)^2 + (x-2l)^2]$

$\epsilon = \frac{E}{E_0(x=1)} = \frac{(x-2h)^2 + (x-2k)^2 + (x-2l)^2}{3}$



Minsta värden på $|\vec{G}|$:

$\vec{G} = \{000\}$ $E = x^2$

$\vec{G} = \{111\}$ $E = (x-2)^2$

$\left. \begin{matrix} \bar{1} \bar{1} \bar{1} \\ 1 \bar{1} \bar{1} \\ 1 \bar{1} \bar{1} \end{matrix} \right\} E = (2(x-2)^2 + (x+2)^2) / 3$

$\left. \begin{matrix} 1 \bar{1} \bar{1} \\ \bar{1} 1 \bar{1} \\ \bar{1} \bar{1} 1 \end{matrix} \right\} E = ((x-2)^2 + (x+2)^2 \cdot 2) / 3$

$\bar{1} \bar{1} \bar{1}$ $E = (x+2)^2$

$\left. \begin{matrix} 200 \\ 020 \\ 002 \end{matrix} \right\} \frac{(x-4)^2 + 2x^2}{3}$

$\left. \begin{matrix} \bar{2}00 \\ 0\bar{2}0 \\ 00\bar{2} \end{matrix} \right\} \frac{(x+4)^2 + 2x^2}{3}$

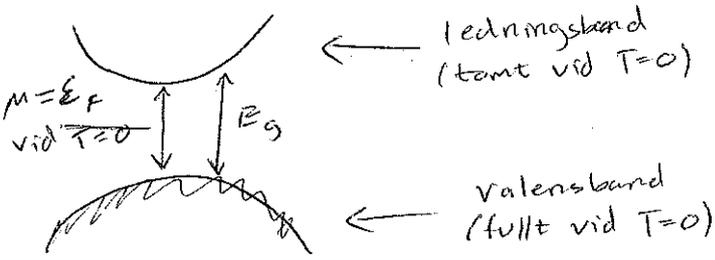
Halvledare (kap 8)

20/2-14

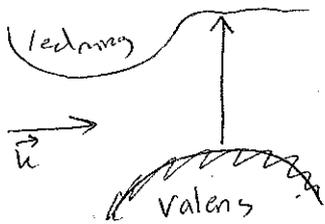
Isolator med litet bandgap

Ex: Ge, Si, GaAs

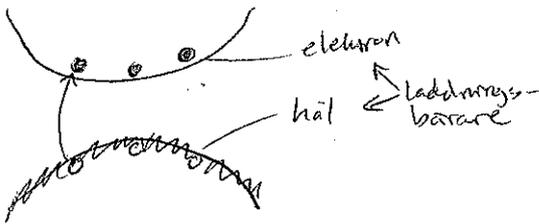
Direkt gap: Min av ledningsband vid samma k som max av valensband



Indirekt gap:

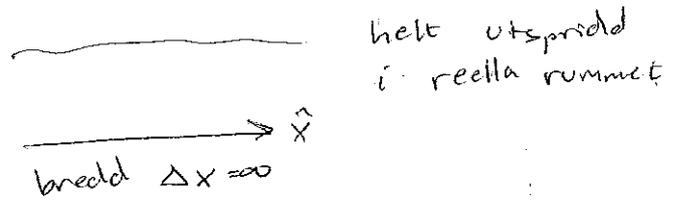
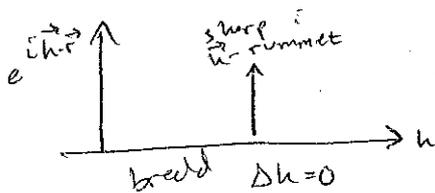


$T \neq 0$: termiska energin lyfter elektroner från valens- till ledningsband

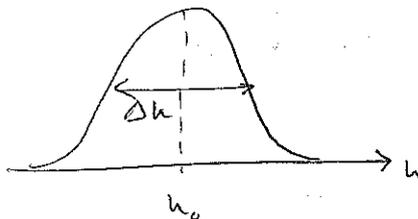
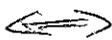
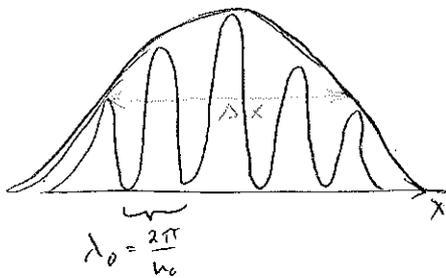


Bakgrund:

- Grupp hastighet
- Blochvågor (elektron i periodisk potential) är superposition av planvågor som är helt delokaliserad

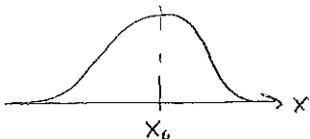


Mer realistiskt:



Ex: Gaussiskt vågpaket (1D) $\psi \sim e^{ik_0 x} e^{-x^2/2(\Delta x)^2}$

Antag att vid $t=0$: centrerad vid $x=0$



$\psi(x, t=0) \stackrel{\text{Fourierutr.}}{=} \int dk A(k) e^{ikx}$
 Fourierkomponenter (Fouriertransform)

Tidsutveckling: varje komponent e^{ikx} är en lösning till Schrödelev.

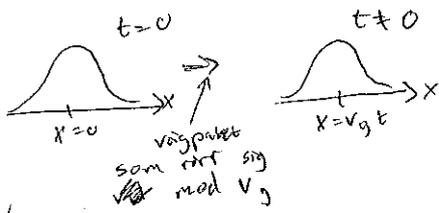
$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi = E_k \psi \Rightarrow e^{ikx - i\omega t}$, $\omega(k) = \frac{E_k}{\hbar}$

Vid tid t :

$\Rightarrow \psi(x, t) = \int dk A(k) e^{ikx - i\omega(k)t}$
 utveckla $\omega(k)$ runt k_0 ger att $A(k)$ har max vid k_0 :
 $\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0} + \dots$
 gruppshastighet: $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$

$\Rightarrow \psi(x, t) = \int dk A(k) e^{ikx} e^{-i(\omega(k_0) + (k - k_0)v_g)t}$

$= e^{i(k_0 v_g - \omega_0)t} \int dk A(k) e^{ik(x - v_g t)}$
 bara en fas $\omega_0(k_0)$ $\psi(x - v_g t, t=0)$, som $\psi(x, t=0)$ för centrerad vid $x = v_g t$



1D: $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

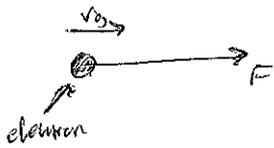
3D: $\vec{v}_g = \nabla_{\vec{k}} \omega = \hat{x} \frac{\partial \omega}{\partial k_x} + \hat{y} \frac{\partial \omega}{\partial k_y} + \hat{z} \frac{\partial \omega}{\partial k_z}$

alt. $\omega = \frac{E_k}{\hbar} \Rightarrow \vec{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_k$

Rörelseelvation för blockelektron

- Eftersom elektronerna i en kristall (dvs. energier i band $E_{k,n}$)
- Så kan de inte röra sig helt fritt
- Men vi ska visa att $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}$ är korrekt rörelseelv. (naturlig eftersom rörelsemängd normalt är $\vec{p} = \hbar \vec{k}$), men i en kristall är $\hbar \vec{k}$ inte rörelsemängd som gemensam rörelsemängd

NB: $\hbar \frac{d\vec{h}}{dt} = \vec{F}$



$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon_n}{dh}$$

kraft
↓
strömma

Kraft verkar på blockelektron över tid δt : arbetet: $W = F v_g \delta t$

Arbetet = ändring i energi $\Rightarrow \frac{\delta \epsilon_n}{\frac{d\epsilon_n}{dh} \delta h} = F v_g \delta t \Rightarrow \hbar v_g \delta h = F v_g \delta t \Rightarrow$

$$\Rightarrow \hbar \frac{dh}{dt} = F$$

Rörelselv. $\hbar \frac{dh}{dt} = F \Rightarrow \frac{mv}{dt} = F$

Effektiv massa

En elektron i en kristall har en effektiv massa $m^* \neq m_e$

Låt oss titta på $\frac{dv}{dt} = v = \frac{dw}{dh} \Rightarrow \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{dw}{dh} = \left\{ \begin{array}{l} h \text{ ändrar sig i} \\ \text{tiden enligt } \hbar \frac{dh}{dt} \end{array} \right.$

$$= \frac{d^2 w}{dh^2} \frac{dh}{dt} = \frac{d^2 w}{dh^2} \frac{1}{\hbar} F = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dh^2} \right) F \Rightarrow \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dh^2} \right)^{-1} \frac{dv}{dt} = F$$

dimension: 1/massa

$\equiv m^*$ effektiv massa
specialfall: $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Rightarrow m^* = m_e$

i 3D: $\frac{dv_i}{dt} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial h_j \partial h_i} \right) F_i \Rightarrow$

$$\Rightarrow \sum_j m_{ij}^* \frac{dv_i}{dt} = F_i, \quad \vec{r} = x, y, z, \quad m^* \text{ är matris i 3D}$$

EX Antag $\epsilon_h = a(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \Rightarrow$

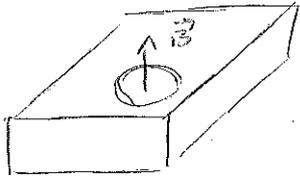
$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial h_i \partial h_j} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} 2a & 0 & 0 \\ 0 & 2a & 0 \\ 0 & 0 & 2a \end{pmatrix} = (m_{ij}^*)^{-1} \Rightarrow m^* = \begin{pmatrix} \hbar^2/2a & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2/2a & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2/2a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m^* & 0 & 0 \\ 0 & m^* & 0 \\ 0 & 0 & m^* \end{pmatrix}$$

$$m^* = \hbar^2/2a$$

Effektiv massa $m^* \neq m_e$, gittret kan ta upp rörelsemängd

EX Elektron i magnetfält $\vec{B} = B\hat{z}$ (B konstant), givet

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \text{ R.E. } m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B} = e(-\hat{y}v_x B + \hat{x}v_y B)$$



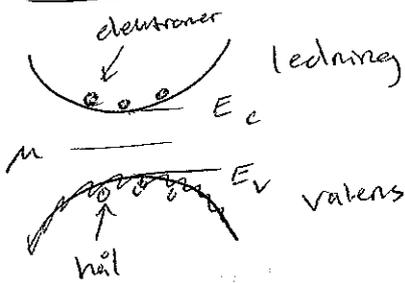
$$\begin{cases} m^* \frac{dv_x}{dt} = -ev_y B \\ m^* \frac{dv_y}{dt} = ev_x B \end{cases} \quad \text{Lösning: } \vec{v} = v(\cos\omega t, \sin\omega t)$$

$$\Rightarrow \underline{m^* \omega = eB}$$

Cirkulär rörelse med vinkelhastighet $\omega_c = \omega = \frac{eB}{m^*}$ (cyklotronfrekvensen)

Här ur kan m^* mätas experimentellt

Halvledare



E_c : botten av ledningsbandet

E_v : toppen av valensbandet

Energin för elektroner i ledningsbandet: $E_{\vec{k}} = E_c + a\hbar^2$

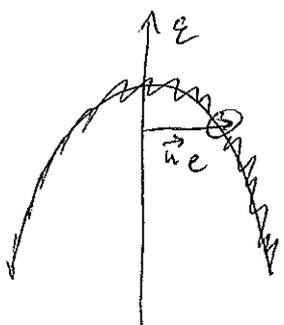
valensbandet: $E_{\vec{k}} = E_v - b\hbar^2$

Effektiv massa.

Ledningse⁻: $(m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial \hbar^2} a\hbar^2 = \frac{2a}{\hbar^2} \Rightarrow \underline{m^* > 0}$

Valens e⁻: $(m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial \hbar^2} (-b\hbar^2) = -\frac{2b}{\hbar^2} \Rightarrow \underline{m^* < 0}$ negativ massa!

Naturligare att beskriva laddningsbärare i valensbandet som hål.



Såsom en elektron (i det annars fulla bandet) med vägtal \vec{h}_e

① Hålets vägtal $\underline{\vec{h}_h = -\vec{h}_e}$

Fyllt band $\vec{h}_{tot} = \sum_{1/BZ} \vec{h} = 0$ men om elektron med \vec{h}_e saknas $\Rightarrow \vec{h}_{tot} = -\vec{h}_e = \vec{h}_h$

② Energi för hålet.

Såsom det en partikel (elektron) med energi

$$E_{\vec{h},e} < 0 \Leftrightarrow \text{systemet har högre energi} \Leftrightarrow E_{\vec{h},h} = -E_{\vec{h},e}$$

③ Hastighet

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \Rightarrow \vec{v}_{g,h} = \vec{v}_{g,e}$$

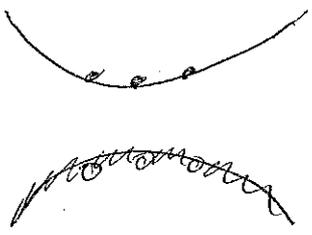
④ Effektiv massa

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \Rightarrow m_{h,h}^* = -m_{e,e}^* \Rightarrow \text{effektiva massan för hål i valensbandet } > 0$$

⑤ Laddning

$q_h = e > 0$, hål: avsaknad av elektron

Konduktiviteten i halvledare



$T \neq 0$: Elektroner i ledn. bandet, hål i valens bandet

E -fält \Rightarrow ström

• För elektroner $m_e^* \frac{dv_e}{dt} = -m_e^* \frac{v_e}{\tau_e} - eE$

τ_e kollisionsstid

stationärt: $v_e = -\frac{e\tau_e E}{m_e^*}$ ← driftfart

→ Ström $j_e = -en_e v_e = \frac{e^2 n_e \tau_e}{m_e^*} E = \sigma_e E$

täthet

• För hålen: $m_h^* \frac{dv_h}{dt} = -m_h^* \frac{v_h}{\tau_h} + eE \xrightarrow{\frac{dv_h}{dt}=0} v_h = \frac{e\tau_h E}{m_h^*}$ (motsatt tecken med elektronerna)

ström: $j_h = en_h v_h = \frac{e n_h^2 \tau_h}{m_h^*} E = \sigma_h E$

Samma tecken på strömmen men olika tecken på driftfart och laddning.

Låt oss kalla $n_e = n$ elektr. täthet ("negativ")

$n_h = p$ håltäthet ("positiv")

Vi kan nu skriva totala strömmen $j = j_e + j_h = (\sigma_e + \sigma_h) E$

dar $\sigma_e = n e \mu_e$ ← mobilitet (OBS: ej kemisk potential)

och $\sigma_h = p e \mu_h$

$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e^*}$

$\mu_h = e \frac{\tau_h}{m_h^*}$

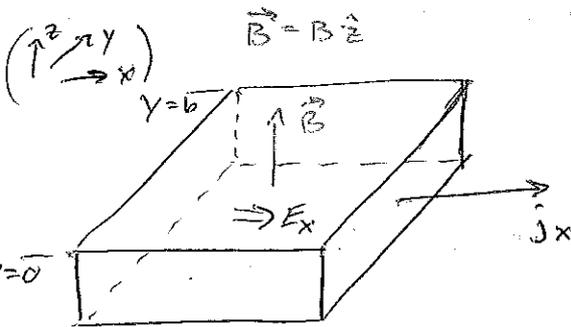
Mobilitet $\mu = \frac{\text{flödeshastighet}}{\text{elektriskt fält}}$

Mobiliteten beskriver kvaliteten på halvledaren.

Konduktiviteten: $\sigma = n e \mu_e + p e \mu_h$

Två typer av laddningsbärare, hur vet man vilken som leder ström?

Hall-effekten (kap 6)



B -fält \Rightarrow kraft $q \vec{v} \times \vec{B} = \{v = v_q \hat{x}\} =$

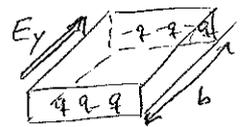
$= -q v_q B \hat{y}$, $q = \begin{cases} e & \text{hål} \\ -e & e^- \end{cases}$

$v_q = \begin{cases} q > 0: & \frac{e\tau_h}{m_h^*} E > 0 \\ q < 0: & -\frac{e\tau_e}{m_e^*} E < 0 \end{cases}$

spänning i x -led \Rightarrow ström $j_x > 0$

Kraften blir i $-\hat{y}$ -riktningen oberoende av om vi har elektroner eller hål.

Laddningsuppbyggnad vid $y=0 \Rightarrow$ Elektriskt fält E_y



Spänning $V_y = b E_y$

Vi tar inte ut någon ström $j_y \Rightarrow$ Vi får jämvikt där nettokraften

i \hat{y} -led = 0: $q E_y - q V_q B = 0 \Rightarrow E_y = V_q B = \left(\frac{j_x}{n_q q} \right) B$

Hallkoefficienten: $R_H = \frac{E_y}{j_x B} = \frac{1}{n_q q}$, $n_q = \begin{cases} n, q < 0 \\ p, q > 0 \end{cases}$

Tecken på R_H : $\begin{cases} > 0 & \text{då har vi hål} \\ < 0 & \text{då har vi elektroner} \end{cases}$, magnitud $\frac{1}{n}$ eller $\frac{1}{p}$

Om vi har både p och n, då fås $R_H = \frac{1}{e} \left(\frac{p - n \left(\frac{m_e}{m_h} \right)^2}{\left(p + n \left(\frac{m_e}{m_h} \right)^2 \right)^2} \right)$

$R_H > 0$: p-typ halvledare

$R_H < 0$: n-typ halvledare

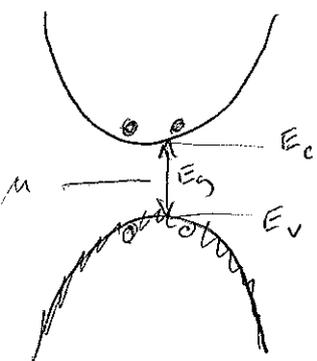
Laddningsstäthet n och p

Två typer:

Intrinsek halvledare: $n = p$

Dopad halvledare: Stoppat in atomer med fler eller färre valenselektroner, t.ex. As (5 valens) i Ge (4 valens) kristall

Beräkna Laddningsstäthet



$E_g = E_c - E_v$, gapet är stort: $E_g \gg k_B T$

Typiska $E_g \approx 0,1 \sim 1 \text{ eV} \Leftrightarrow \frac{E_g}{k_B} \approx 1000 \sim 10000 \text{ K}$

Vi antar (vilket vi ska visa) att μ ligger ungefär i mitten av gapet:

$E_c - \mu \gg k_B T$ och $\mu - E_v \gg k_B T$

Antalet elektroner, täthet:

$$n_h = \frac{1}{e^{(E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} - \mu)/k_B T} - 1}$$

Fermi-Dirac-fördelning

med $E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$

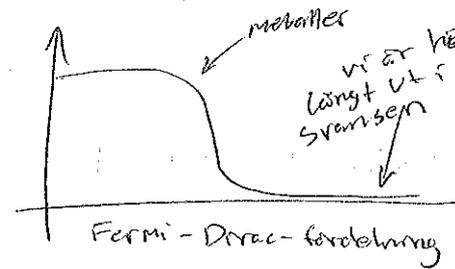
för $E_c - \mu \gg k_B T$ där får vi $e^{(E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} - \mu)/k_B T} \gg 1$, glöm inte: $\frac{1}{(-)+1}$

$$\Rightarrow n_h = e^{-(E_c + \epsilon_k - \mu)/k_B T}$$

där $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$

antal atomer med vägvektor k

vanligt Boltzmann



$$n = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} n_h = \left\{ \epsilon_k \text{ bara beror på } |k| \right\} =$$

total täthet

$$= \frac{1}{V} \int D(\epsilon) n(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{V} e^{-\beta(E_c - \mu)} \int d\epsilon \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \sqrt{\epsilon} e^{-\beta\epsilon}$$

varab. subs. $x = \beta\epsilon$

$B = \frac{1}{k_B T}$ $I = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

$$= \frac{1}{V} e^{-\beta(E_c - \mu)} \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx \sqrt{x} e^{-x} = \left\{ E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (3\pi^2 \frac{N}{V})^{2/3} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow n = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c - \mu)/k_B T} \approx 10^{10} \text{ a } 10^{15} / \text{cm}^3$$

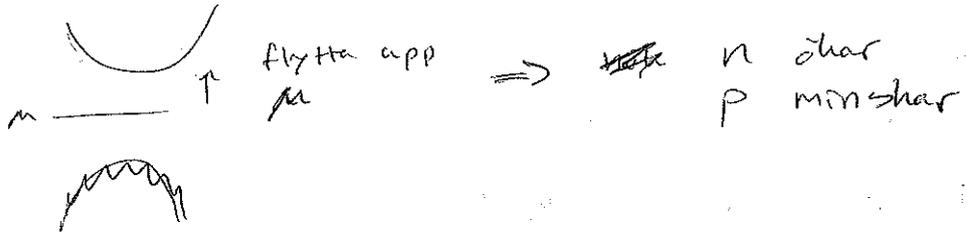
$\ll 1$ att jämföra med metall $n \approx 10^{23} / \text{cm}^3$

$\sim 10^{20} / \text{cm}^3$ (vid rumtemp.)

För hål: $p_h = 1 - \text{sannolikhet för elektron} \Rightarrow \mu - E_v \gg k_B T \Rightarrow$

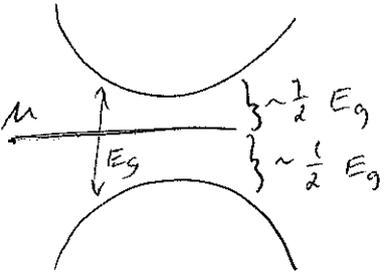
$$\Rightarrow \dots \Rightarrow p = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(E_v - \mu)/k_B T}$$

$\ll 1$



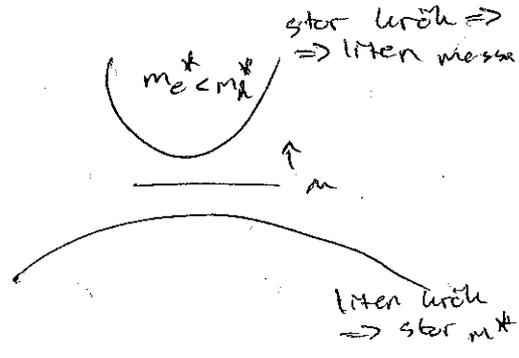
Intronsiv: $n-p \rightarrow$ ^{bestämmer μ} $2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_C - \mu}{k_B T}} = 2 \left(\frac{m^* \hbar k_B T}{2\pi \hbar^2} \right) e^{-\frac{E_C - \mu}{k_B T}}$

$\Rightarrow \dots \Rightarrow \mu = \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m^*}{m_e}$
 \uparrow
 $E_V + \frac{1}{2} E_g$
 mitt i gapet
 otyrskt liten $\sim k_B T$



Andra termen: $\sim \ln \left(\frac{m^* \hbar}{m_e} \right)$

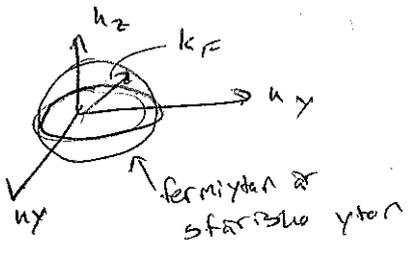
Tillståndst.
 $D(\epsilon) \sim m^{3/2}$



Fermiytor kap 9

| 24/2 - 14

- Ytan i k -rummet som separerar tomma från fulla tillstånd vid $T=0$
- Viktigt för metaller
- För fria elektroner



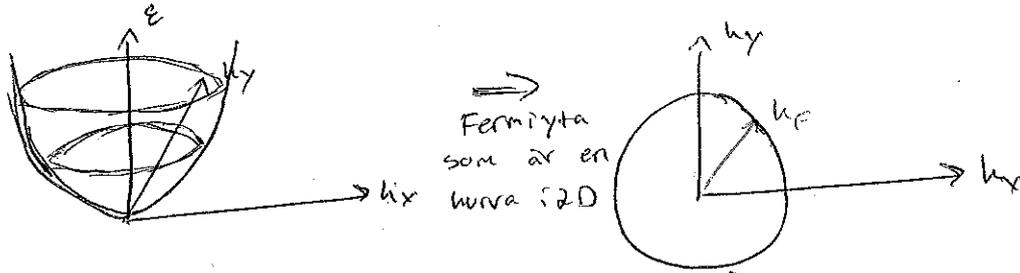
• I en kristall: energiband $\epsilon_{\vec{k}, n}$
 n : bandindex
 \vec{k} : gitterväktal

Fermiytan $\epsilon_{\vec{k}, n} - E_F = 0 \Rightarrow$ i k -rummet en yta/band $n=1, 2, 3, \dots$

Titta på detta i 2D, utgå från svag potential \rightarrow tomma gittermodellen

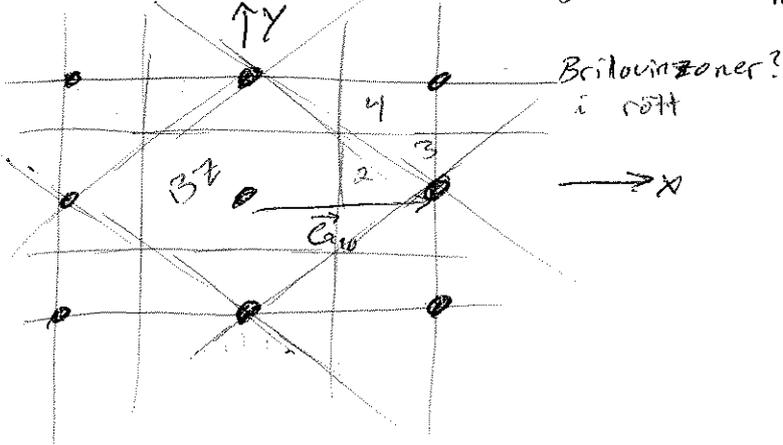
Ex 2D + kvadratisk gitter

Utgå från frielektron $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



med gitter, reciproka

gittret $\vec{G}_{hk} = \frac{2\pi}{a}(h, k)$



Hur stor är k_F givet att vi har N_{valens} elektroner per atom?

(i 3D: $k_F = (3\pi^2 N)^{1/3}$, $n = \frac{N_{\text{atom}} - n_{\text{valens}}}{V}$) spinn \downarrow

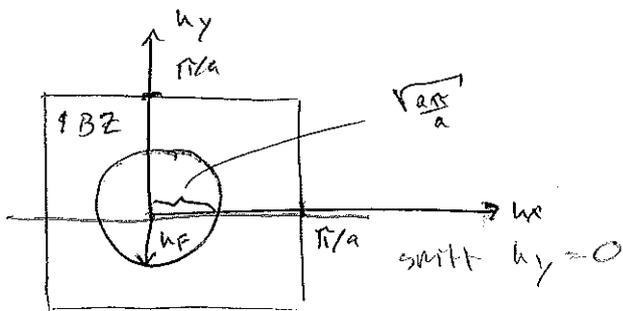
i 2D: Tillstånd innanför k_F : $\underbrace{\pi k_F^2}_{\text{tätthet i k-rummet}} \cdot \underbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2}_{\text{spinn}} \cdot 2 \quad (1)$

Antal elektroner: $N_{\text{atom}} - n_{\text{valens}} = \left(\frac{L}{a}\right)^2 n_{\text{valens}} \quad (2)$

(1) = (2) $\Rightarrow \pi k_F^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2 = \left(\frac{L}{a}\right)^2 n_{\text{valens}} \Rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} \sqrt{n_{\text{valens}}}$

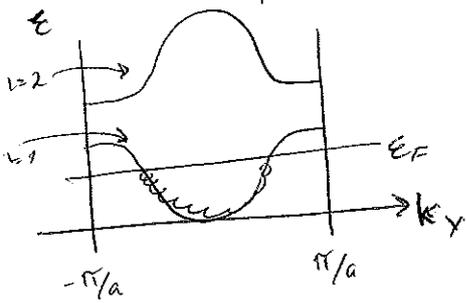
Antag 1 elektron/atom: $n_{\text{valens}} = 1$, $k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} < \frac{\pi}{a} \Rightarrow$

\Rightarrow stoppa från ytan på reciproka gittret



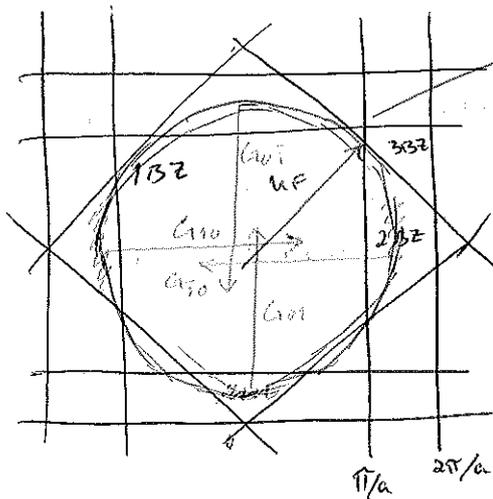
Ytan är långt ifrån BZ kantar (broggplan), påverkas endast lite av svag potential

Snittytan: ($k_y = 0$)



Antag istället 5 elektroner/atom, $n_{\text{valens}} = 5$

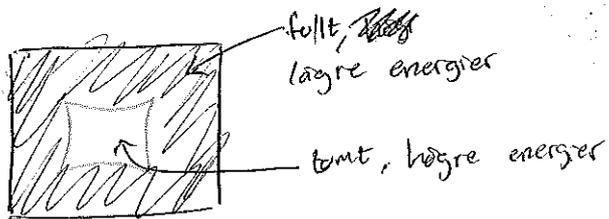
$$k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} \sqrt{5} \approx 0,89 \frac{2\pi}{a} > \frac{\pi}{a} < \frac{2\pi}{a}$$



från s-fären

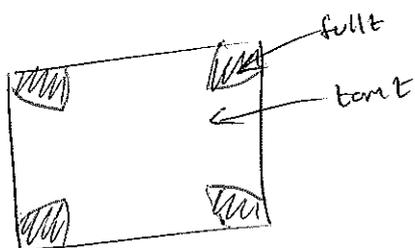
Bestäm i 1:a BZ genom att translatera med \vec{G}_{nh}

Från BZ 2 i andra ~~bandet~~ bandet

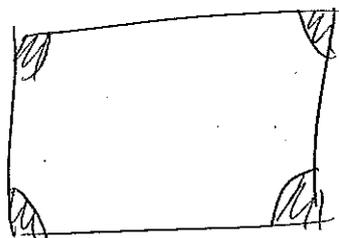


Fermiytan för andra bandet

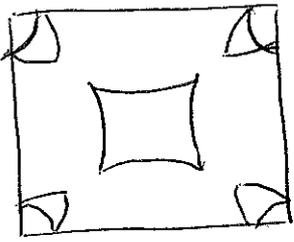
3:e bandet fermiyta



4:e bandet fermiyta



Totala fermiytan är bidragen från alla band:

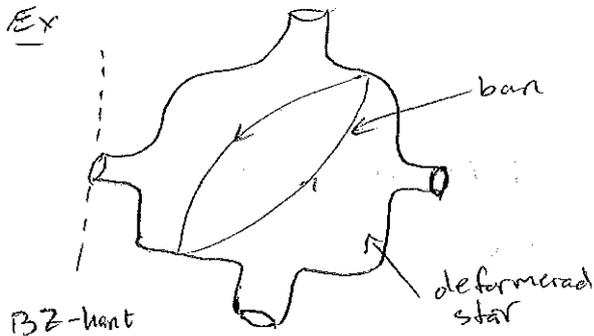


Fermiytan består av 3-band i det här fallet

~~Elektroniska ytor, hålliga ytor~~

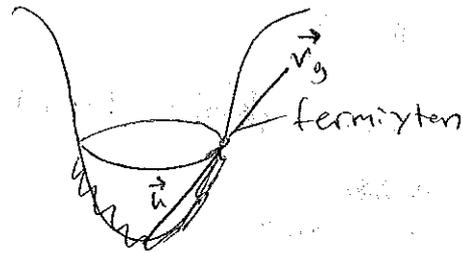
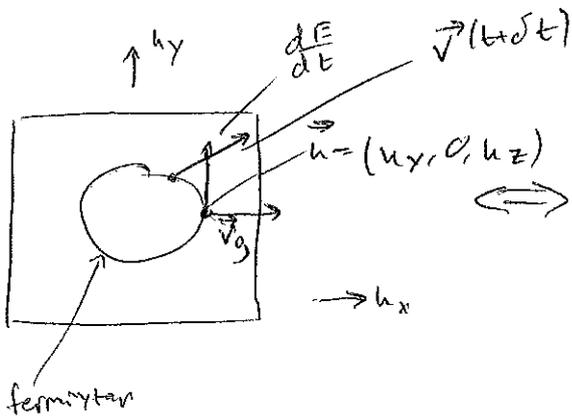
Elektroniska ytor, hålliga ytor

Bana: En kurva längs med fermiytan



- En bana är elektronisk om en elektron i banan rör sig som en elektron, dvs. negativt laddad partikel
- En bana är hålrik om elektronen rör sig som en positivt laddad partikel

2D



Betrakta en partikel på fermiytan i ett magnetfält

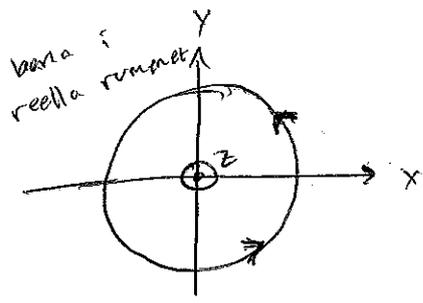
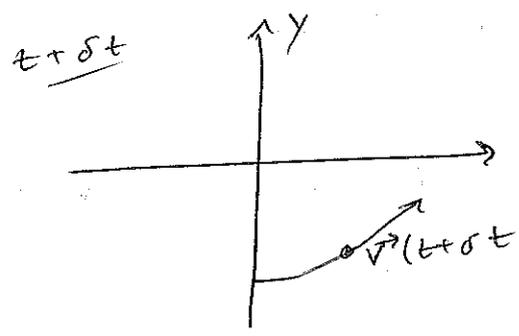
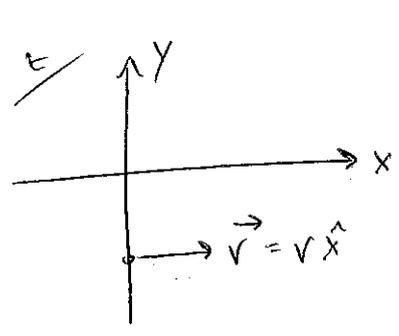
$$\vec{B} = B \hat{z}$$

R.E.
$$\hbar \frac{d\vec{h}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B}$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{h}} \epsilon_{\vec{h}} = \left[\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \right] = \frac{\hbar \vec{h}}{m^*}$$

om $\vec{h} = (h_x, 0, h_z) \Rightarrow -e\vec{v} \times \vec{B} \sim e \frac{\hbar}{m^*} (h_x \hat{x} + h_z \hat{z}) \times \hat{z} B =$
 $= \frac{e\hbar k_x B}{m^*} \hat{y}, \quad \frac{d\vec{h}}{dt} \sim \hat{y}$

1 reella rummet

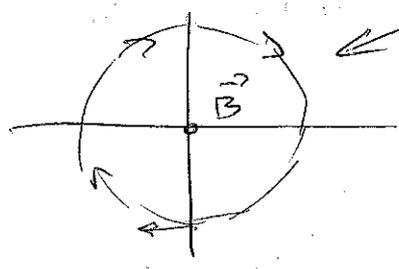


som en elektron
 $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$, dvs elektronisk bana
OBS Eftersom B-fält inte gör arbete
 måste partikeln röra sig på fermiytan

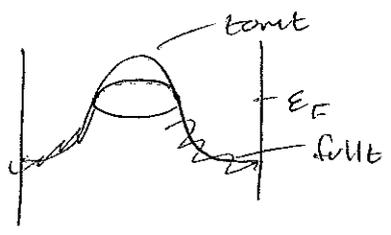
hållt



reella rummet

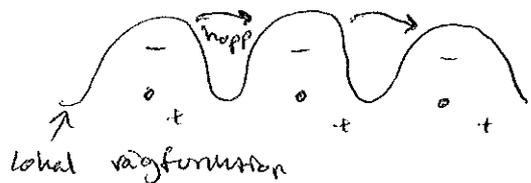


rör sig som positivt laddad partikel



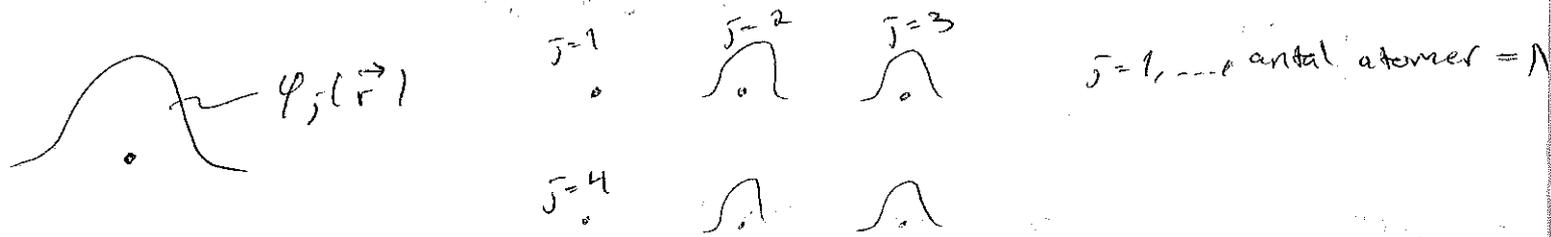
Beräkna Fermiytor

- Svag potential, utgå från fr elektron
- Stark potential, utgå från atomära vågfunktioner



Tight-binding modellen

Utgå från lokal vågfunktion på varje atom:



Försök hitta en vågfunktion av

formen $\Psi_{\vec{k}} = \sum_j C_j \psi(\vec{r} - \vec{r}_j)$, superposition av lokala vågfunktioner

Lösning till S.E. har blochform: $\Psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$
 ↑
 periodisk som gitteret

Ansätt lösning på formen:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_1)} \psi(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

← periodisk

Energier för ett tillstånd:

$$\begin{aligned} E_{\vec{k}} &= \langle \vec{k} | H | \vec{k} \rangle = \int d^3\vec{r} \Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) H \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j,m} e^{i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_m)} \underbrace{\langle \psi_j | H | \psi_m \rangle}_{=} \\ &= \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r} - \vec{r}_j) H \psi(\vec{r} - \vec{r}_m) = \end{aligned}$$

= ngt tal beror på j och $m \neq 0$ om atom j är långt bort från atom m

Räkneövning

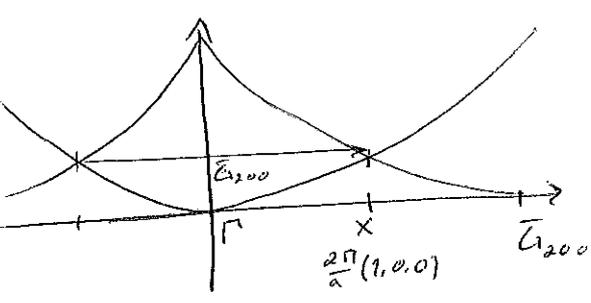
(24/2-14)

EF6 Si, Ge

Diamantstruktur, fcc med bas (0,0,0) och $a(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

4 elektroner i yttersta skalet

$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$ h, k, l alla udda eller alla jämna



Bandgap genereras av diffraktion med vågvektor $\Delta k = \vec{G}_{200}$

Struktur faktor $S_{200} = (1 + e^{i\vec{k} \cdot a(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})}) = (1 + e^{i\pi}) = 0$

$E_{\vec{k}} \approx E_{\vec{k}-\vec{G}}$, Egenvärdesproblem $E \begin{pmatrix} \psi_{\vec{k}} \\ \psi_{\vec{k}-\vec{G}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & V_{\vec{G}} \\ V_{-\vec{G}} & E_{\vec{k}-\vec{G}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\vec{k}} \\ \psi_{\vec{k}-\vec{G}} \end{pmatrix}$

$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} V_{\vec{G}}$ på zongränsen $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}-\vec{G}}$

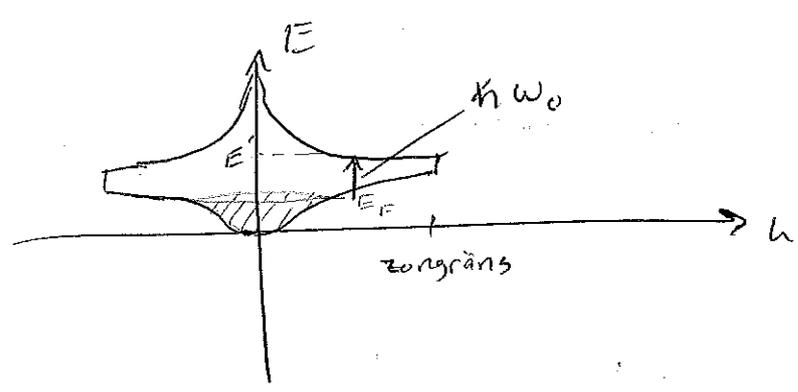
$E = E_{\vec{G}/2} \pm |V_{\vec{G}}| \Rightarrow$ gap $2|V_{\vec{G}}|$ men i vårt fall är

$V_{\vec{G}_{200}} = 0$

EF9 Alkalimetaller Li, Na, K, Rb, Cs

1 valenselektron/atom

BCC-kristall, fermiyten är frielektronlik



$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$
 $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{1}{a} (6\pi^2)^{1/3}$

lägsta möjliga optiska excitation med $\Delta k = 0$

$$E' = \frac{\hbar^2}{2m} (\hbar k_F + \vec{G})^2$$

$$\frac{\hbar \omega_0}{E_F} = \frac{E' - E_F}{E_F} = \frac{(\hbar k_F + \vec{G})^2 - \hbar^2 k_F^2}{\hbar^2 k_F^2} = \frac{|\vec{G}|^2 + 2 \hbar k_F \cdot \vec{G}}{\hbar^2 k_F^2} =$$

2 {Välj riktning för $\hbar k_F$ motriktad \vec{G} } = $\frac{|\vec{G}|^2}{\hbar^2 k_F^2} - \frac{2|\vec{G}|}{k_F}$

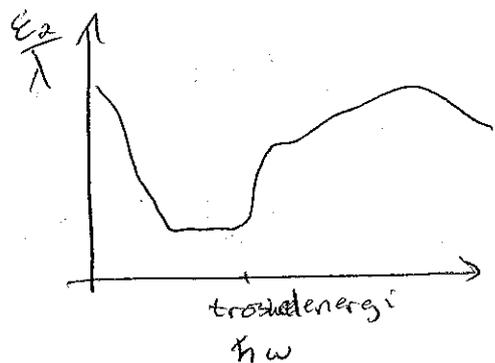
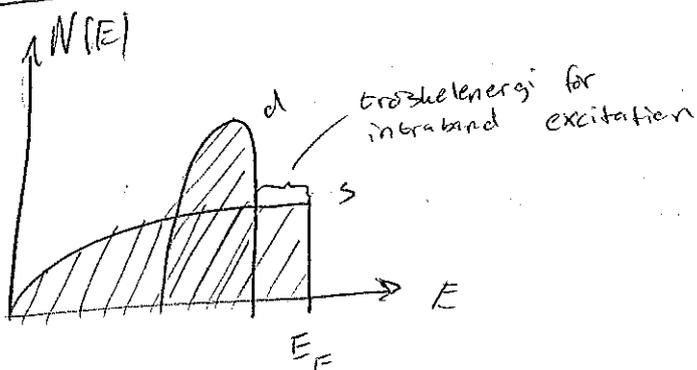
$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h, k, l) \quad \text{hittad jämnt}$$

Kortast \vec{G} : t.ex. $|\vec{G}_{110}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2}$

$$\frac{|\vec{G}_{110}|}{\hbar k_F} = \frac{2\pi \sqrt{2}}{(6\pi^2)^{1/3}} \approx 2.28$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar \omega_0}{E_F} \approx 0.64$$

EF11 Bandstruktur



Cu, $\hbar\omega = 2\text{eV}$

översatt till våglängd $\lambda = \frac{ch}{\hbar\omega} = 1240 \frac{\text{nm eV}}{\hbar\omega}$

$\lambda_{\text{Cu}} \approx 620 \text{ nm}$ (oranger-rött)

Absorbera alla synliga våglängder utom rött \Rightarrow ser rött ut

Ag: $\hbar\omega = 4\text{eV}$ $\lambda = 310 \text{ nm}$ (UV) \Rightarrow absorberar inte synligt ljus \Rightarrow ser vitaktigt ut

Al: $\hbar\omega \approx 2.3 \text{ eV}$

$\lambda = 540$ (grönt), absorberar blått och violett

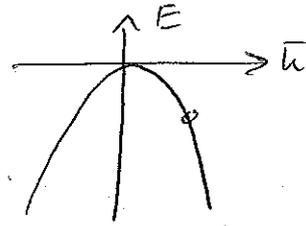
\Rightarrow ser gulaktigt ut

H1 Hältillstånd

Kan formuleras beskrivning genom att använda håltillstånd



valensband som är fyllt eller nästan fyllt



$$E = E_{vmax} - \alpha k^2$$

$$\alpha = 10^{-37} \text{ J m}^2$$

Plockar bort elektron med vågvektor $k_e = 10^9 \text{ m}^{-1}$

b) Vågvektorn $k_h = -k_e$ eftersom tillståndet inte längre är fyllt

d) Energi $E_h = -E_e$

Om $E_{vmax} = 0$, $E_e = -\alpha k_e^2$

$$E_h = -E_e = \alpha k_e^2 = 10^{-37} \cdot 10^{18} \text{ J} = 10^{-19} \text{ J} \approx 0,62 \text{ eV}$$

a) Effektiv massa

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

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$$

relaterad till kröningen hos dispersionen

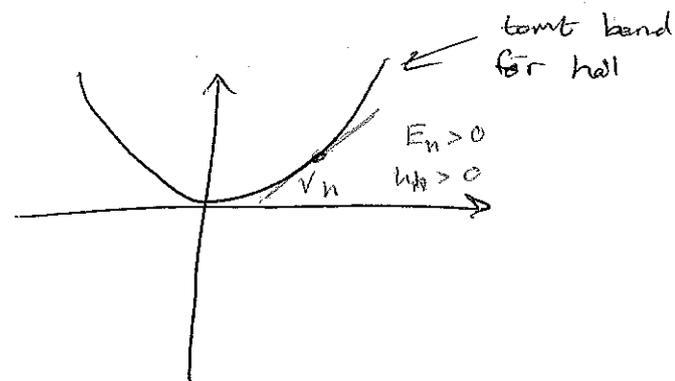
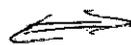
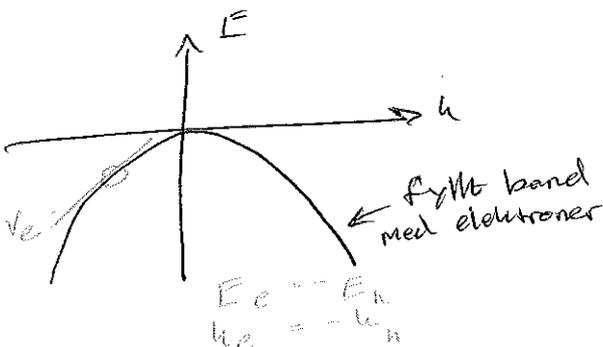
$$= -\frac{\hbar^2}{2\alpha} = -5,56 \cdot 10^{-32} \text{ kg} \approx -0,06 m_e$$

$$M_h^* = -m_e^* = 0,06 m_e$$

c) Hastigheten

$$v_e = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial k} = -\frac{2\alpha k_e}{\hbar} \approx -1,9 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

$$v_h = v_e$$



Tight-binding modellen (hüchelmodellerna)

27/2-14

Utgår från atomära vågfunktioner

Energien $E_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{j,m} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_j)} \langle \psi_j | H | \psi_m \rangle$

↑
summer över atomer

$\langle \psi_j | H | \psi_m \rangle = \int d^3r \underbrace{\psi_j^*(\vec{r} - \vec{r}_j)}_{\substack{\text{atomära vågfunk.} \\ \text{centrerad i } \vec{r}_j}} H \underbrace{\psi_m(\vec{r} - \vec{r}_m)}_{\substack{\text{kinetisk + potentiell}}}$

tecknat konvention

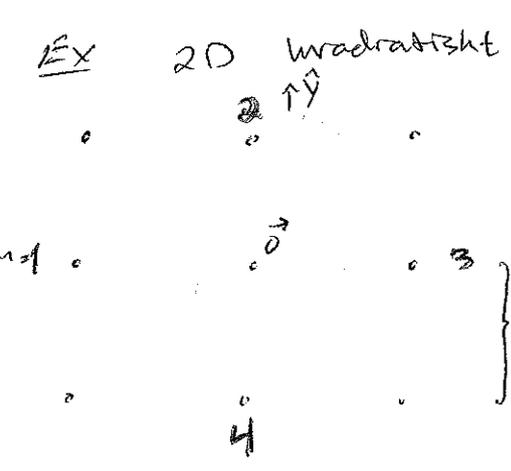
- α om $m=j$, dvs. samma atom
- γ om m och j är närmsta granna
- 0 om m och j är längre från varandra

$\Rightarrow E_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_j \underbrace{-\alpha e^{i\vec{k} \cdot \vec{0}}}_{-\alpha N} + \frac{1}{N} \sum_{\substack{j, m \\ m=\vec{r}_m \\ \text{är granna till } \vec{r}_j}} \sum_j -\gamma e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_j)} \Rightarrow$

ta $j = \vec{r}_j = 0$

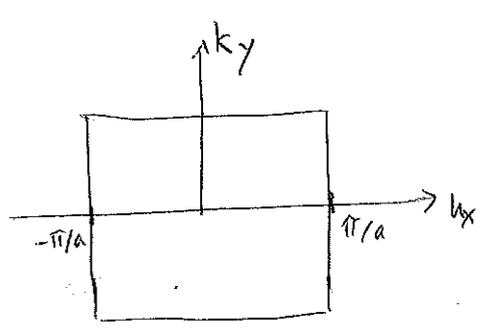
$\Rightarrow E_{\vec{k}} = \alpha - \gamma \sum_{\substack{m \text{ granna till } 0}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_m}$

$E_{\vec{k}}$ beror på gittret, hur många granna



$\left. \begin{aligned} \vec{r}_1 &= -a\hat{x} \\ \vec{r}_2 &= a\hat{y} \\ \vec{r}_3 &= a\hat{x} \\ \vec{r}_4 &= -a\hat{y} \end{aligned} \right\} \Rightarrow E_{\vec{k}} = -\alpha - \gamma (e^{-ik_x a} + e^{ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) =$
 $= -\alpha - 2\gamma (\cos k_x a + \cos k_y a)$

Första BZ, ta $k_y = 0 \Rightarrow E_{k_x} = -\alpha - 2\gamma - 2\gamma \cos k_x a$



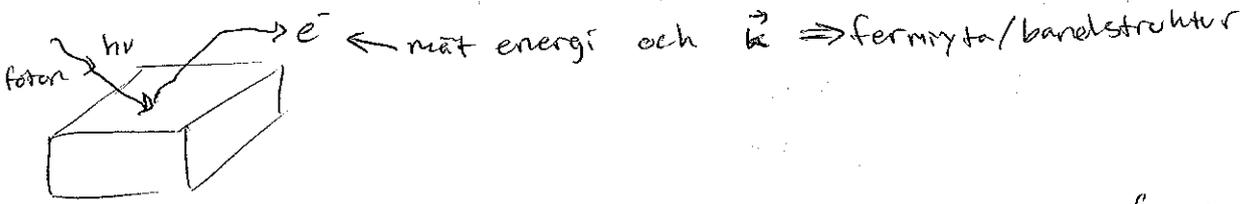
Ett band
Fler orbitaler per atom \Rightarrow fler band

• Två sätt att få en bandstruktur:

- Fria elektroner + svag periodisk potential
- tight-binding modellen

Måta band/fermytor

• Modern ARPEIS (Angle Resolved Photoemission)



- Måta oscillationer av elektroniska egenskaper som funktion av magnetfält

• De Haas-von Alphen effekt: oscillation av termodynamiska enheter, t.ex. C_V

Elektroner i magnetfält

- Svagt fält \Rightarrow elektronerna kan beskrivas klassiskt \Rightarrow periodiska banor längs fermytan
- Starkare fält \Rightarrow kvantmekanisk beskrivning nödvändig \Rightarrow lös

Schrödingers för elektron i magnetfält

Hamiltonian: $H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\phi$, där $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ och $\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$

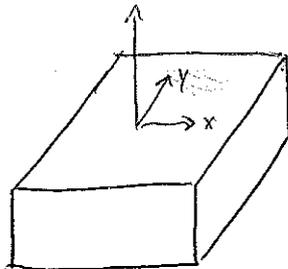
↑
skalarpot.
vektarpotential

Rörelsekv. $m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}]$

S.E. $H\psi(x,y) = E\psi(x,y)$ där vi har statiskt magnetfält $\vec{B} = B\hat{z}$ och $\vec{E} = 0$.

Vi kan välja $\vec{A} = \vec{B} \times \hat{y}$, $\phi = 0$

$\vec{B} = B\hat{z}$ | Landau gauge



$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{(p_y + eBx)^2}{2m}$$

$$(\vec{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} - i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} = p_x \hat{x} + p_y \hat{y})$$

$H\psi = E\psi$? lösningar?

H beror inte på y, bara $\frac{\partial}{\partial y} \Rightarrow$

\Rightarrow ansätt lösning $\psi(x,y) = e^{-iky} \psi(x)$

egenfun
till $\frac{\partial}{\partial y}$

$$H \psi(x) = \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m} (-\hbar k + e x B)^2 \right) \psi(x) =$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \left(\frac{eB}{m} \right)^2 \left(x - \frac{\hbar k}{eB} \right)^2 \right) \psi(x) =$$

$\omega_c = \frac{eB}{m}$ magnetisk längd, $x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - x_0)^2 \right) \psi(x)$$

$\frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - x_0)^2$ Harmonisk oscillator!

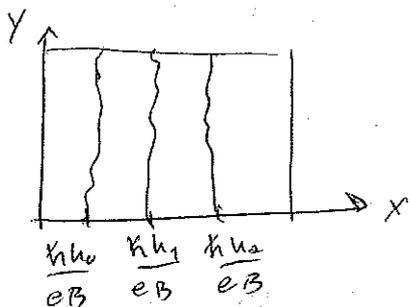
Lösningar $\psi(x) = H_n(x - x_0)$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Notera, de är centrerade i $x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$

$$H \psi(x, y) = E \psi(x, y) \text{ där } E = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi(x, y) = e^{-i k_y y} H_n(x - x_0)$$

Två kvanttal k och n istället för k_x och k_y



Lösningarna är degenererade:

Alla ψ_{kn} med samma n har samma energi (energin oberoende av k)

En nivå n ($n=0$, eller $n=1, \dots$) kallas Landau-nivå

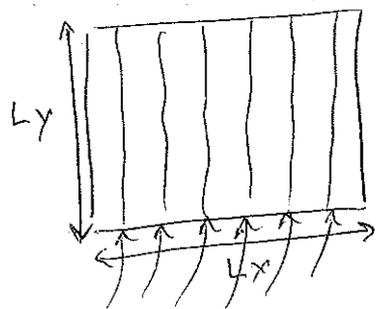
Hur många tillstånd i en Landau-nivå?

Samma n

Vi måste ha x_0 : $x_0 < L_x$ och $x_0 > 0$
(vi kan inte ha tillstånd som lever utanför)

$$\Rightarrow 0 < x_0 < L_x \Rightarrow 0 < k < \frac{L_x e B}{\hbar}, \text{ räkna } k\text{-värden}$$

$$\frac{\hbar k}{eB} \quad \text{spinn} \downarrow \quad 2 \left(\frac{L_x}{2\pi} \right) \Rightarrow$$



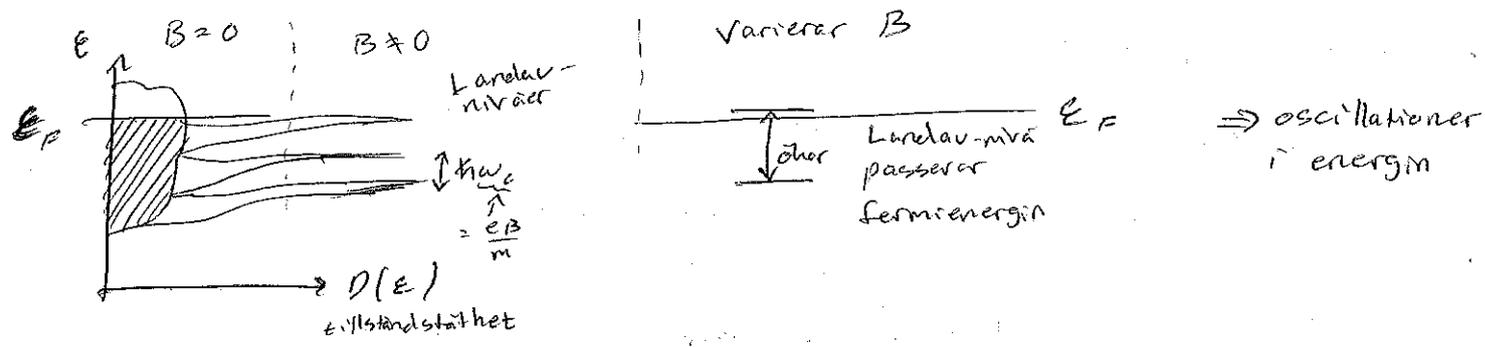
olika $k \Rightarrow$ olika $x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$

antal tillstånd i en Landau-nivå

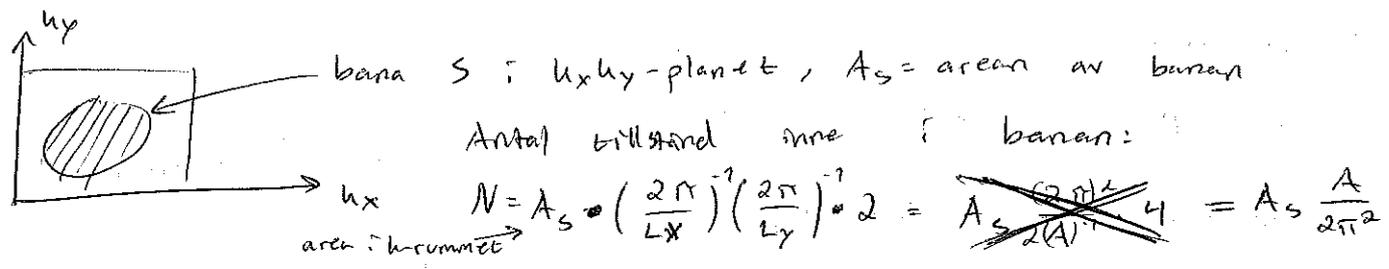
$$\Rightarrow N_{\text{Landau}} = \frac{L_x e B}{\hbar} \cdot 2 \left(\frac{L_y}{2\pi} \right) = L_x L_y \frac{B}{\Phi_0} = A \frac{B}{\Phi_0}$$

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e}$$

↑
Fluxkvant



Kan uttryckas i termer av banor på fermiytan ortogonala mot B



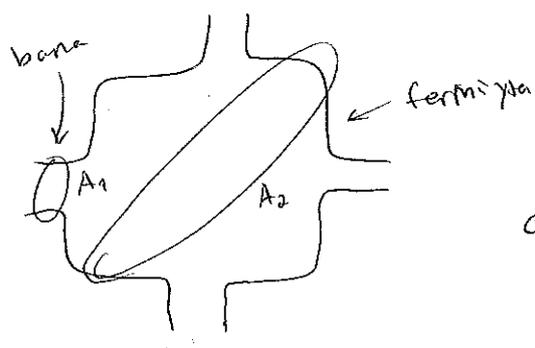
I ett magnetfält är detta kvantiserat i $N =$ ett helt antal laddningsnivåer = N_{Landau} heltal \Rightarrow kvantiserade banor

$\Rightarrow \frac{A_S}{2\pi^2} A = \frac{B}{\Phi_0} \cdot \text{heltal}, A_S = 2\pi^2 \frac{B}{\Phi_0} \cdot \text{heltal}$

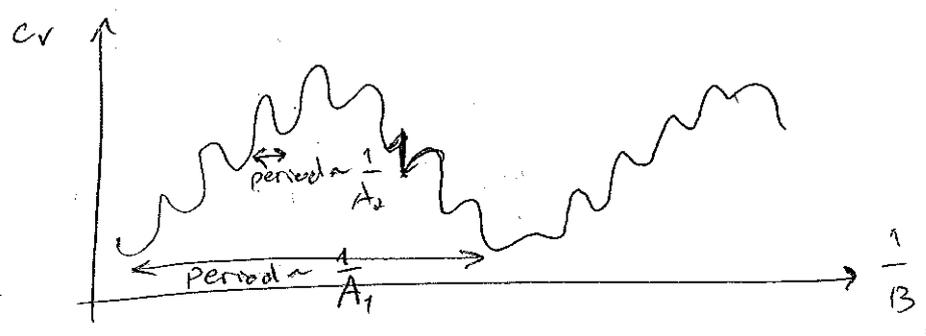
A_S : area av bana på fermiyta

$A_S = 2\pi^2 \frac{B}{\Phi_0} \cdot \text{heltal} \Rightarrow \frac{1}{B} = \frac{2\pi^2}{\Phi_0 A_S} \cdot \text{heltal}$

$\Delta \frac{1}{B} = \frac{2\pi^2}{\Phi_0 A_S}$ gör att detta stämmer, periodiskt i $\frac{1}{B}$, period $\sim \frac{1}{A_S}$

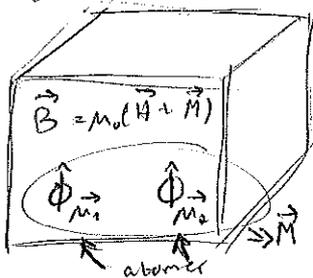


Extremumbanor \Rightarrow starkast respons



Magnetism kap 11,12

Magnetisering: M , magnetiskt moment \vec{M} : magnetiskt moment



magnetfält \vec{B} (magnetiska induktionen)
 totala fysikaliska fältet

magnetfält \vec{H} (makroskopiskt, $\nabla \times \vec{H} = \vec{J}$)

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

magnetisk susceptibilitet

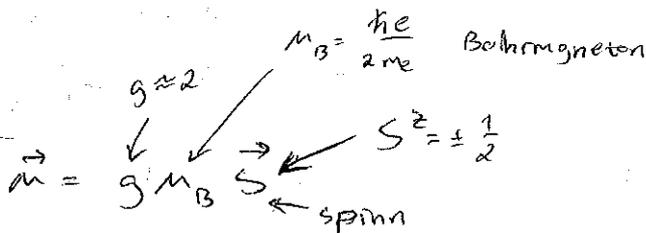
$\chi > 0$ paramagnet

$\chi < 0$ diamagnet

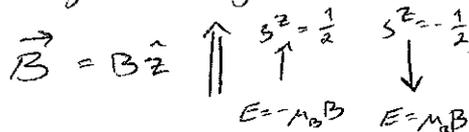
$\vec{M} \neq 0$ for $\vec{H} = 0 \iff$ ferromagnet

Paramagnetism för elektrongas

Varje elektron: magnetiskt moment $\vec{m} = g \mu_B \vec{S}$



Energ i magnetfält: $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$



Beräkna magnetisering: $M = \mu_B (n_{\downarrow} + n_{\uparrow})$

där $n_{\uparrow} = \frac{N_{\uparrow}}{V}$ täthet av e^- med $S^z = \frac{1}{2}$

Totala energin för en elektron:

(antag kinetisk $E_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$)
 från elektroner

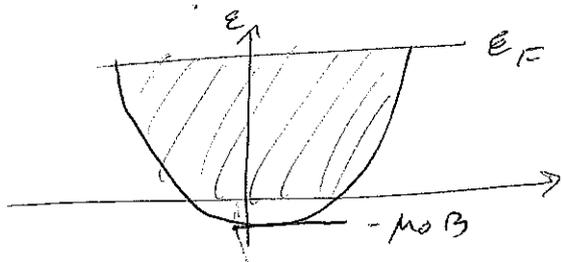
$$n_{\downarrow} = \frac{N_{\downarrow}}{V} \quad S^z = -\frac{1}{2}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \mu_B B$$

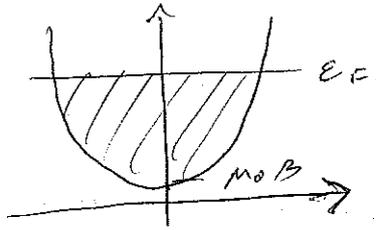
$T=0$: fyller alla tillstånd som ger så låg energi som möjligt

$$N_{\uparrow} = \int_{-\mu_B B}^{E_F} \tilde{D}(E) dE = \int_{-\mu_B B}^{E_F + \mu_B B} \frac{D(E)}{2} dE = a \frac{2}{3} (E_F + \mu_B B)^{3/2}$$

$$= a \frac{2}{3} E_F^{3/2} \left(1 + \frac{\mu_B B}{E_F}\right)^{3/2} \approx \left\{ \frac{\mu_B B}{E_F} \ll 1 \right\} \approx a \frac{2}{3} E_F^{3/2} + a \sqrt{E_F} \mu_B B$$



$$N_{\downarrow}, \text{ p.s.s.} \Rightarrow N_{\downarrow} = \frac{2}{3} E_F^{3/2} - a \sqrt{E_F} m_B B$$



$$a: \frac{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}{\frac{4}{3} a E_F^{3/2}} = N \Rightarrow a = \frac{3}{4} \frac{N}{E_F^{3/2}}$$

$$\Rightarrow M = m_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = \frac{m_B}{V} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) = \frac{2}{3} \frac{n m_B^2 B}{E_F} \quad (n = \frac{N}{V})$$

Pauli paramagnetism: litet by $\frac{m_B B}{E_F} \ll 1$

Resultatet fås ett diamagnetiskt bidrag

$$M_{\text{dia}} = -\frac{1}{3} M_{\text{para}}$$

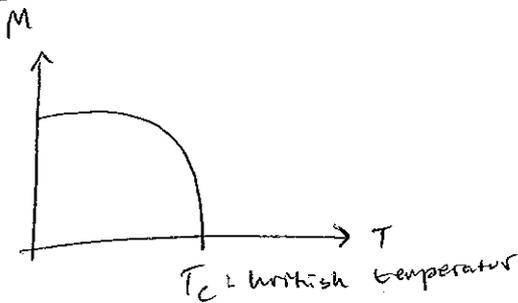
Landau diamagnetism

kommer från

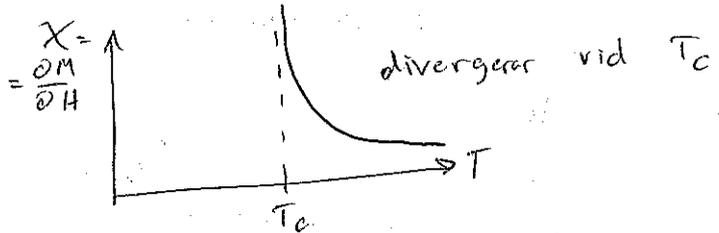


Ferromagnetism

Fe, Ni, Co är ferromagneter



$T < T_c: M \neq 0$ även om $H = 0$

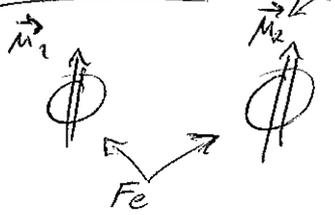


Typiska T_c : Fe - 1043 K, Co - 1388 K

Magnetisk ordning:  spinnen måste "prata" med varandra

När kommer växelverkan från?

Växelverkan



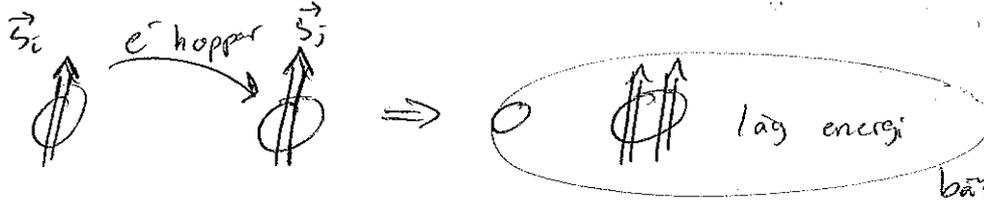
$\vec{B}_2 \sim \frac{\mu_0}{r^3} \vec{M}_2$

Dipol-Dipol växelverkan:

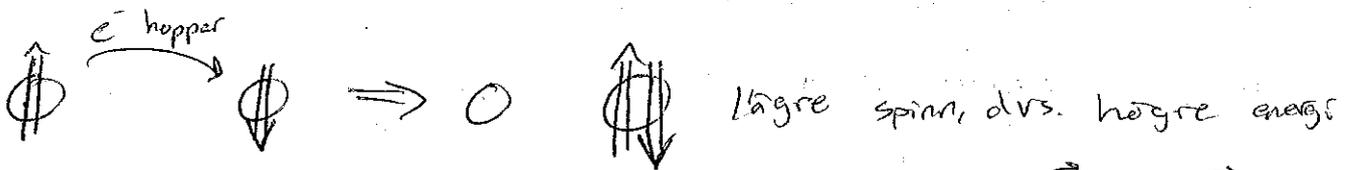
$E_{\text{dipol-dipol}} \sim \vec{M}_1 \cdot \vec{B}_2 \sim \frac{\mu_B^2}{r^3} \sim 10^{-4} \text{ eV}$ för Fe \Rightarrow

$\Rightarrow \frac{E_{\text{dipol-dipol}}}{k_B} \approx 1 \text{ K}$, för svagt för att ge en effekt vid 1000K

Stark växelverkan kommer från atomfysik, Hund's regel nr 1



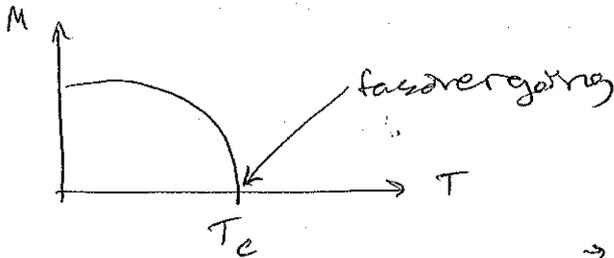
maximera spinn på ej fylld orbital



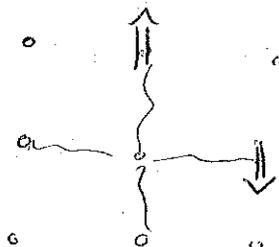
Ger växelverkan: $E = \dots = J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$
energi skala

$J > 0 \Rightarrow \vec{S}_i$ och \vec{S}_j vill vara parallella
 J kan vara $\sim 0, 1 \text{ eV}$

Exempel på modell med fasövergång:



Hersenbergmodellen: $H = -T \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$
i,j: närmaste granne till i



På varje gitterplut sitter ett spinn \vec{S}_i , $i = 1, \dots, N$

Kvantmekaniskt: \vec{S} är operatorer

För spinn $-\frac{1}{2}$ $S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

verkar på $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
 $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

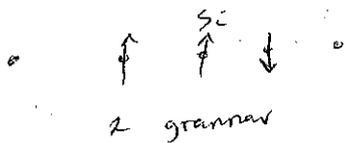
Gör medelfälts teori:

$$H = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle = \left\{ \text{ta } \langle \vec{S}_i \rangle = \vec{S} \right\}$$

ta medelvärdet

$$= -J \sum_i S_i^2 \vec{S} \text{ (antal grannar)}$$

bara ett spinn i ett
effektivt magnetfält: $J\vec{S}$

Gör 1D:  2 grannar

Effektivt fält: $B = 2JS$

Beräkna $\langle S_i \rangle$ Boltzmann fördelning

$$= \frac{1}{2} \frac{e^{\frac{1}{2} B/k_B T} - \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2} B/k_B T}}{e^{\frac{1}{2} B/k_B T} + e^{-\frac{1}{2} B/k_B T}}$$

termoväntevärde \approx tillståndssumma

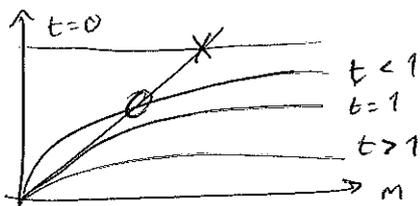
$$= \frac{1}{2} \tanh \frac{B}{2k_B T} \Rightarrow \boxed{2\vec{S} = \tanh \frac{2JS}{2k_B T}} \text{ självkonsistenskvation}$$

för $\vec{S} = \langle \vec{S}_i \rangle$

Skriv $m = 2\vec{S}$, $t = \frac{2k_B T}{J}$ ← effektiv temp. \Rightarrow

$$\Rightarrow m = \tanh \frac{m}{t}$$

Plotta $y=m$ och $y = \tanh \frac{m}{t}$



För $t < 1$ finns lösning $m \neq 0$
 -- $t > 1$ -- || -- $m = 0$ (bara)

dvs fasövergång vid $t=1$



$$t=1 \Leftrightarrow 2k_B T = J \rightarrow T_c = J/2k_B$$

Vad händer vid låga temperaturer?

$m \approx 1$, små t

$$\tanh \frac{m}{t} \approx \frac{e^{m/t} - e^{-m/t}}{e^{m/t} + e^{-m/t}} = \frac{1 - e^{-2m/t}}{1 + e^{-2m/t}} \approx$$



$$\approx (1 - e^{-2m/\hbar}) (1 - e^{-2m/\hbar} + \dots) = 1 - \frac{2e^{-2m/\hbar}}{\ll 1} + \dots \text{ mindre termer}$$

$m \approx 1 - e^{-2m/\hbar}$, exponentiellt liten reduktion av m med t ;
det är fel!

$\uparrow \uparrow \Rightarrow \uparrow \downarrow$ kostar energi $2m$, stor energi

i en bättre beskrivning finns lågenergiexcitationer: spinnvågor/magnoner
 $m = 1 - aT^{3/2}$

Magnoner

Från ett ordnat tillstånd: $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$ grundtillstånd
 Gill $H = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$

Kan vi göra små ändringar: $\uparrow \uparrow \rightarrow \rightarrow \downarrow$
 spinnvåg
 utlösning

Kvantmekaniskt: $H = -J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z + S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y$

$|\text{Grundtillstånd}\rangle = |\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow\rangle$
 (Gs) $\underbrace{\quad\quad\quad}_{-3/4}$
 N

$H|Gs\rangle = -\frac{J}{4} N |Gs\rangle = E_0 |Gs\rangle$

Exciterat tillstånd:

$|\Psi_j\rangle = |\uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow\rangle$
 $\underbrace{\quad\quad}_{3/4} \quad \underbrace{\quad\quad}_{3/4}$

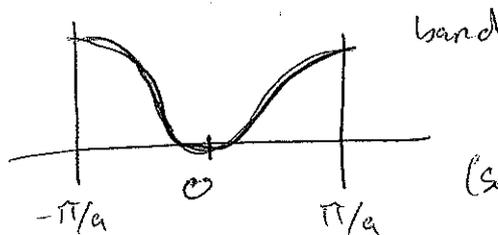
$H|\Psi_j\rangle = (E_0 + J)|\Psi_j\rangle = \frac{1}{2} J (|\Psi_{j-1}\rangle + |\Psi_{j+1}\rangle)$

Lösning: $|\Psi_u\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikaj} |\Psi_j\rangle$

$H|\Psi_u\rangle = (E_0 + J)|\Psi_u\rangle - \frac{1}{2} J \sum_j (e^{ikaj} |\Psi_{j+1}\rangle + e^{ikaj} |\Psi_{j-1}\rangle) =$
 $\sum_j e^{ikaj} (e^{ika} + e^{-ika}) |\Psi_j\rangle$

$= \underbrace{(E_0 + J - J \cos ka)}_{E_u} |\Psi_u\rangle$

Magnoner



Ferromagnetism (fortsättning)

Ett spin (magnetiskt moment)

$$\vec{m} = g \mu_B \vec{J}$$

från atomfysiken
 g-faktor Bohr-magnetonen
 kvanttal

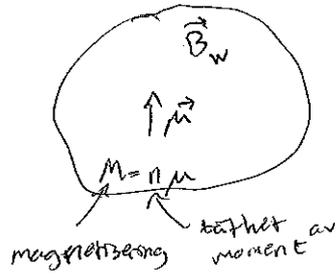
Växelverkan med grannar:

$$\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \rightarrow \vec{m} \approx \chi \chi' - J_{M \cdot M}$$

konstant $\sim 0,1 eV$

Medelfältsteori \Leftrightarrow ersätt alla grannar med ett "medelfält"

\vec{B}_w : Effektivt fält från $\chi \chi'$ (Weissfält)



Antag $B_w \sim M$

$$B_w = \lambda M$$

prop konstant dimensionlös

verkligt magnetfält

Ett spin \vec{m} i ett fält

$$B_{tot} = B + B_w \leftarrow \text{Weiss-fältet} \rightarrow$$

\Rightarrow paramagn spin

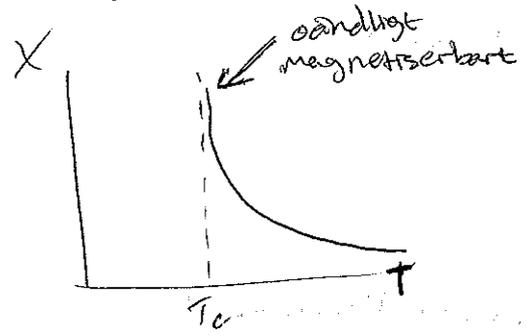
Om M litet: Curies lag $M = \frac{C}{T} \left(\frac{B}{\mu_0} \right)$ där $C \approx \mu_0 \frac{\mu_B^2 n g^2 J(J+1)}{3k_B} \sim \text{Kelvin}$

statfys
 klassisk
 J-quantal

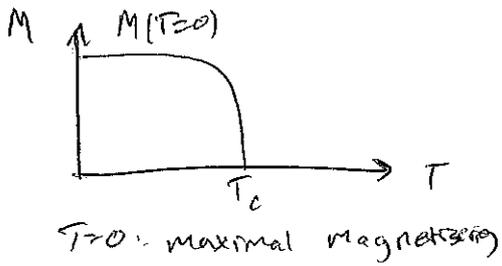
$$M = \frac{C}{T} \frac{1}{\mu_0} (B + B_w) = \frac{C}{T} \left(\frac{B}{\mu_0} + \lambda M \right)$$

$$M(T - c\lambda) = \frac{CB}{\mu_0}, \quad M = \frac{C}{T - c\lambda} \left(\frac{B}{\mu_0} \right) = \frac{C}{T - T_c} \left(\frac{B}{\mu_0} \right) \quad \text{där } \chi = \frac{\partial M}{\partial (B/\mu_0)} = \frac{C}{T - T_c}$$

$T_c = c\lambda$



För $T < T_c$? förra föreläs.



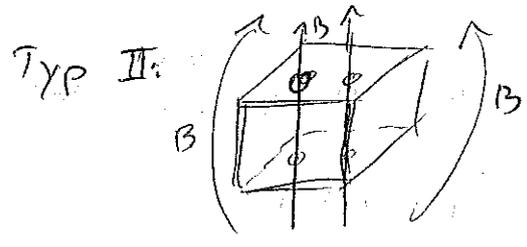
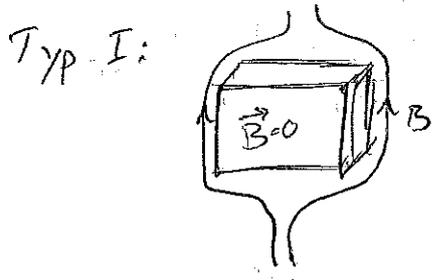
$\uparrow \mu$ $\uparrow \mu$ $\uparrow \mu$ alla μ^{\uparrow} är samma värde
 $M = n\mu$
 atomtäthet

$\mu = (\text{tal ungefär } = 1) \cdot \mu_B$ (Bohrovad atom: heltal $\cdot \mu_B$)

För Fe vid $T = 0$: $\mu \approx 1.1 \mu_B$, dvs. 1.1 Bohrmagneton/atom

Supraledning

- DC-resistivitet = 0
- Meissner-effekten: inget magnetfält i supraledaren
- Typ I: Perfekt Meissner
- Typ II: Magnetfält kan penetrera i fluxtuber

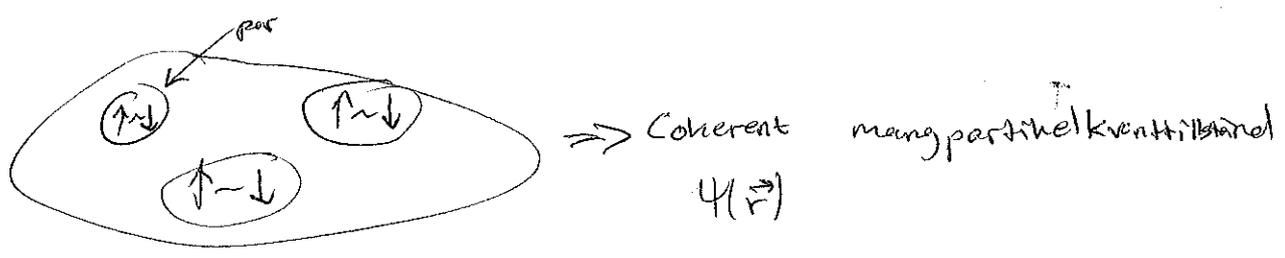


• Elektronerna är ihopparade: Cooperpar

Kollaps av Fermiyten

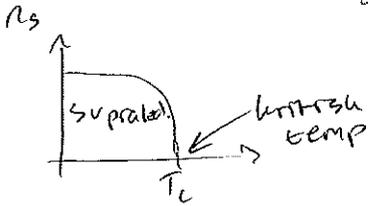
Cooperparen är bosoner \Rightarrow Bose-Einstein kondensat \Leftrightarrow

\Leftrightarrow massa partiklar i lägsta energitillståndet



Skriv $\psi(\vec{r}) = \underbrace{\sqrt{n_s}}_{\text{komplex röghettnation}} \underbrace{e^{i\theta(\vec{r})}}_{\text{fas}}$

Tätheten $\psi^* \psi = n_s \leftarrow$ "super fluid density", täthet av Cooperpar
 \uparrow
 analogt med M för en ferromagnet



Macroroskopisk kvanttillstånd

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{n_s} e^{i\theta(\vec{r})}$$

Meissner effekten: Vad är strömmen i ett magnetfält?

I ett magnetfält:

$$\vec{p} = -\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Ström från Cooperparen: $\vec{j}_s = \psi^* \vec{\nabla} \psi = \frac{n_s}{m} (\hbar \vec{\nabla} \theta - q\vec{A})$

\vec{j}_s : supraleddande strömmen $q = -2e$ för ett Cooperpar

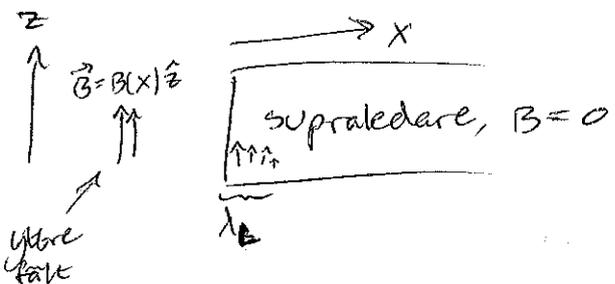
$$\vec{\nabla} \times \vec{j}_s = (\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \theta = 0 \text{ matematiskt}) = \frac{2en_s}{m} \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{2en_s}{m} \vec{B} \leftarrow \text{London ekvationen}$$

+ Maxwell: $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}_s$ (~~$\frac{\partial E}{\partial t}$~~ statiskt)

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \mu_0 \vec{\nabla} \times \vec{j}_s \left. \begin{array}{l} \text{London} \\ \text{ekvationen} \end{array} \right\} \Rightarrow \nabla^2 \vec{B} = - \frac{\mu_0 2en_s}{m} \vec{B}$$

$$\underbrace{\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B}}_{=0} = \frac{4e^2 \mu_0 n_s}{m} \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}, \quad \lambda_L = \left(\frac{m}{4e^2 \mu_0 n_s} \right)^{1/2} \text{ London penetrationsdjup}$$

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}, \quad \text{lösningar: } \vec{B} = \text{konstant, funkar inte}$$



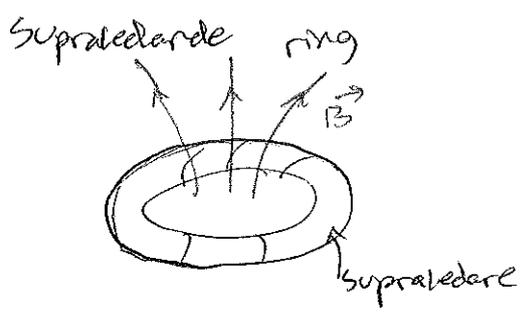
$$\frac{d^2 B}{dx^2} = \frac{1}{\lambda_L^2} B$$

$$\vec{B} = B_0 e^{-x/\lambda_L} \hat{z}$$

Meissner

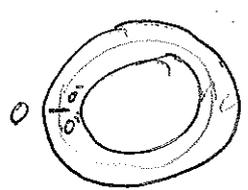
exponentiellt avtagande fält över djup λ_L

Fluxkvantisering



Fält \vec{B} genom ringen,
Inget fält i supraleddaren
 $\nabla \times \vec{B} = 0$

Ekv. för strömmen: $\vec{j}_s = -\frac{2ens}{m} (\hbar \vec{\nabla} \theta + 2e \vec{A}) = 0$ inne i supraleddaren



C-kurva i supraleddaren

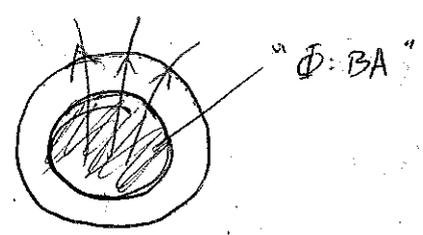
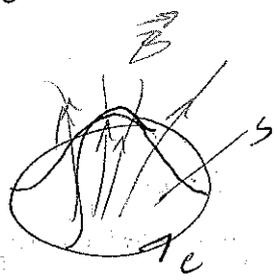
$$\oint_C \vec{\nabla} \theta \cdot d\vec{l} = \theta(0^-) - \theta(0^+) = \Delta \theta$$

θ är en fas för en vågfun $e^{i\theta}$, måste vara unith \Rightarrow

$\Rightarrow \Delta \theta = 2\pi \cdot \text{heltal}$

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \{ \text{Stokes} \} = \int d\vec{s} \cdot \underbrace{(\nabla \times \vec{A})}_{\vec{B}} = \Phi$$

← magnetiska flödet genom ytan S med rand C



$\hbar \cdot 2\pi \cdot \text{heltal} = 2e\Phi \Rightarrow \Phi = \frac{\hbar}{2e} \cdot \text{heltal}$

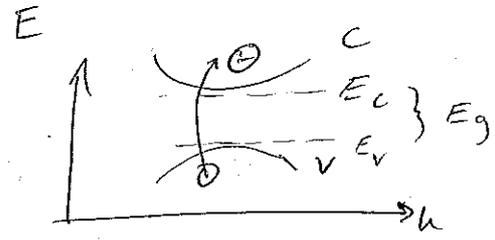
↑
magnetisk fluxkvant

Grunden till en SQUID, kan mäta magnetfält extremt noggrant

Och så persistent currents ström i ytan kan bara minskas
 i kvanta \Rightarrow strömmar som är stabila i 10^5 år

3/3-14

Räkning



(H3)

$$\sigma = n e \mu_e + p e \mu_h$$

$$n_i = p_i$$

$$n = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{m - E_C}{kT}}$$

elektronantal

$$p = 2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_V - m}{kT}}$$

hålantal

$$n_i = p_i = \sqrt{np}, \quad np = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-\frac{m - E_C + E_V - m}{kT}}$$

$$E_C - E_V = E_g$$

$$n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

$$\sigma = 2e \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} (m_e + m_h) e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

$$\sigma = A e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

$$R = \frac{l}{S \sigma} \Rightarrow R = B \exp\left(\frac{E_g}{2kT}\right)$$

värdetsarea

$\ln R = \ln B + \frac{E_g}{2k} \cdot \frac{1}{T}$, blir linjärt $y = a + x \cdot b$
 \uparrow $\ln R$ $\downarrow \frac{1}{T}$

$$b = \frac{E_g}{2k} \Rightarrow E_g = 2kb$$

H13

$$M = \frac{|v|}{E}, \quad \vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

$$\vec{v} = \frac{\vec{F}}{m} \tau, \quad \vec{v} = \frac{q\tau}{m} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}), \quad \vec{j} = \vec{v} n q$$

$$\vec{j} = \frac{q^2 \tau n}{m} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

$$j_{\perp} = \frac{q^2 \tau n}{m} E_{\perp} + \frac{q^2 \tau n}{m} v_{\parallel} B$$

$$j_{\perp} = \frac{q^2 \tau n}{m} E_{\perp} + \frac{q\tau}{m} j_{\parallel} B = 0$$

$$\frac{q^2 \tau n}{m} E_{\perp} = - \frac{q\tau}{m} j_{\parallel} B \Rightarrow E_{\perp} = - \frac{1}{qn} j_{\parallel} B = - R_H j_{\parallel} B \Rightarrow R_H = - \frac{1}{qn} \Rightarrow$$

$\Rightarrow q = -e$, alltså elektroner

$$R_H = \frac{1}{nq} = - \frac{E_{\perp}}{j_{\parallel} B}$$

$$E_{\perp} = \frac{V_{\perp}}{l} = \frac{0.8 \text{ mV}}{4 \text{ mm}} = 1.7 \text{ V/m}$$

$$j_{\parallel} = \frac{I}{S} = \frac{1.5 \text{ mA}}{4 \text{ mm} \cdot 1 \text{ mm}} = 375 \frac{\text{A}}{\text{m}^2}$$

$$R_H = - \frac{E_{\perp}}{j_{\parallel} B} = \frac{1.7}{375 \cdot 0.7} = -0.0065$$

$$n = - \frac{1}{R_H e} = \frac{1}{0.0065 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} \approx 9.6 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$$

$$\sigma = nme = \frac{m}{R_H} \cdot e, \quad \sigma = \frac{j_{\parallel}}{E_{\parallel}} = \frac{j_{\parallel} \cdot l}{V_{\parallel}} = \frac{375 \cdot 10 \cdot 10^{-3}}{78 \cdot 10^{-3}} = 48.07 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow M = \sigma R_H = 0.313 \text{ m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$$