

FÖRELÄSNING 1

20/1-20

Kristallstrukturer

PP:

Fasta material - Kristallina - Enkristallina
- Amorfa - Polykristallina

Bravaisgitter 3D - 7 kristallsystem
- 14 bravaisgitter

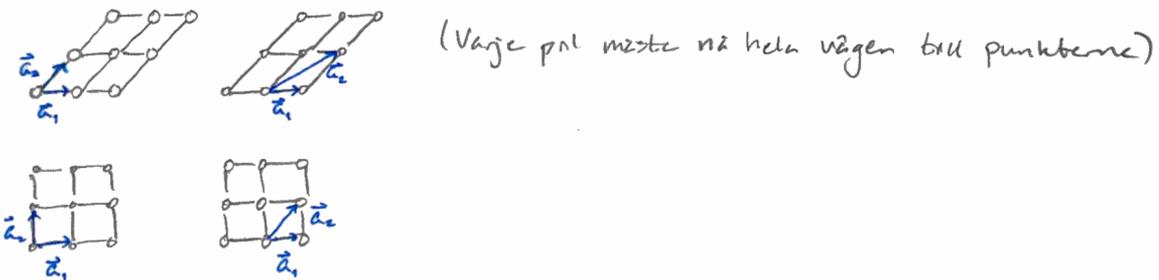
Kristallografi - beskrivning av hur atomer är placerade i material.

Fasta material kan delas upp i två kategorier: kristallina och amorfa.

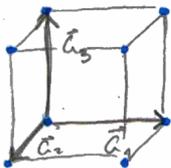
I en kristall finns både närordning och fjärrordning. Kristaller kan beskrivas med ett gitter (lattice).

Def: Ett gitter är en oändlig punktmängd där varje punkt har en identisk omgivning.

2D: \vec{a}_1 och \vec{a}_2 är gittervektorer. De kan väljas på olika sätt



3D:



De tre gittervektorerna spänner upp enhetscellen. De väljs så att \forall för translationsymmetri, dvs:

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3),$$

där u_i är heltal och $f(\vec{r})$ är en godtycklig funktion (t.ex. elektrontätheten).

Om \vec{a}_i väljs så att det bara finns en gitterpunkt per enhetscell, så är gittervektorerna primitiva och enhetscellen är primitiv.

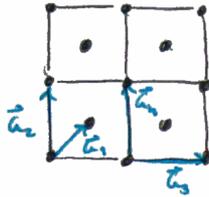
Volymen, V , hos enhetscellen är $V_{\text{cell}} = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|$

I 2D finns fem möjliga gitter, s.k. Bravaisgitter.

I 3D har vi 14 Bravaisgitter.

Ex:

Centrerat rektangulärt gitter i 2D



Rita in primitiva gittervektorer

\hat{a}_1 och \hat{a}_2 är primitiva gittervektorer. 1 gitterpunkt

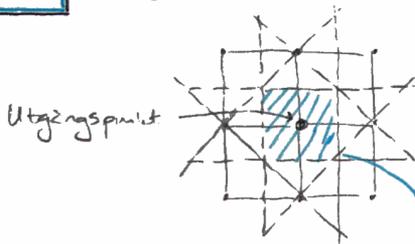
\hat{a}_3 och \hat{a}_4 kallas konventionella gittervektorer. 2 gitterpunkter

Den rektangulära enhetscellen kallas konventionell.

Det finns en speciell primitiv enhetscell, den s.k. Wigner-Seitz cellen. Den definieras m.h.a. symmetriplan mellan varje gitterpunkt, sett från en gitterpunkt.

Ex:

Wigner-Seitz cellen i ett rektangulärt gitter.

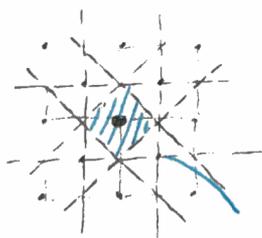


Drag streck, vinkelrätt mot bindningarna, mellan utgångspunkt och alla närliggande punkter

Wigner-Seitz cellen

Ex:

Centrerat rektangulärt gitter



Wigner-Seitz cellen

Kristallplan beskrivs med s.k. Miller index. De bestäms genom följande:

1. Tag planets skärning med a_i (a_1, a_2, a_3)

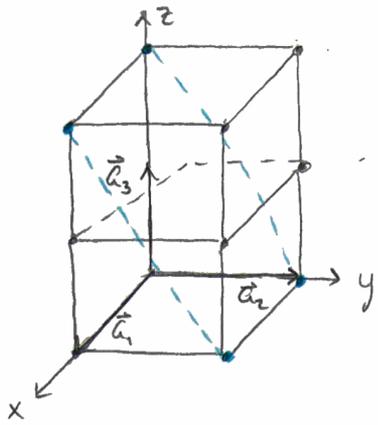
2. Invertera ($\frac{1}{a_1}, \frac{1}{a_2}, \frac{1}{a_3}$)

3. Förläng så att alla a_i blir heltal $\rightarrow (h, k, l)$

h, k och l är Miller index.

obs! Inga kommatecken!

Ex:



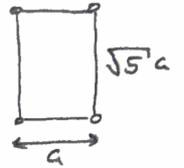
1. Planet skär i $(\infty, 1, 2)$

2. Invertens: $(0, 1, \frac{1}{2})$

3. Förläng med 2: $(0, 2, 1)$

Gitterpunkternas placering i planet:

Negativa tal skrivs \bar{h} istället för h .



Negativa tal skrivs \bar{h} istället för h .

Har betydelse så fort koordinatsystem bestämt.

Specifikt plan skrivs (hkl) Inga kommatecken!

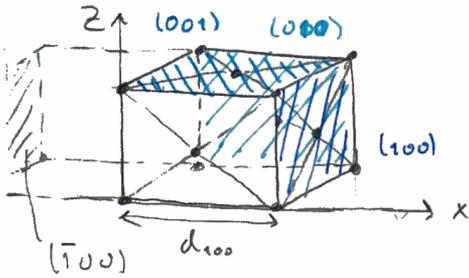
F ÖRELÄSNING 2

22/1-20

ferts.

Ekvivalenta plan skrivs $\{hkl\}$

Ex: FCC - face centered cubic struktur



Specifika plan:

(100):

(010):

(010):

Ekvivalenta plan har samma struktur hos gitterpunkterna i planen.

$\{100\}$ innehåller

(100) (010) (001) ($\bar{1}00$) ($0\bar{1}0$) ($00\bar{1}$)

En specifik riktning skrivs $[hkl]$

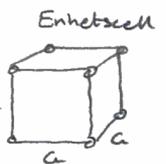
I kubiska system: $[hkl] \parallel \vec{n}_{hkl}$ ej för alla system
 ↑
 normal till planet (hkl)

Ekvivalenta riktningar skrivs $\langle hkl \rangle$

För kubiska system: $[hkl] \parallel \vec{n}_{hkl}$

Planavståndet d_{hkl} för en planskara (hkl) är:

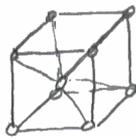
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad a: \text{gitterparametern } a$$



Till varje gitterpunkt hör en eller flera atomer. Atomerna som hör till varje gitterpunkt är en bas.

Vanliga kristallstrukturer där en kristallstruktur beskrivs av gitter + bas:

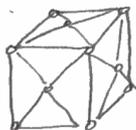
BCC: Body centered cubic



Gitterkoordinater: $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Baskoordinater: $(0,0,0)$

FCC: Face centered cubic



Au, Ag, Cu

Gitterkoordinater: $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Baskoordinater: $(0,0,0)$

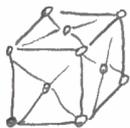
HCP: Hexagonal closed packed



Gitterkoordinater: $(0,0,0)$ $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$

Baskoordinater: $(0,0,0)$

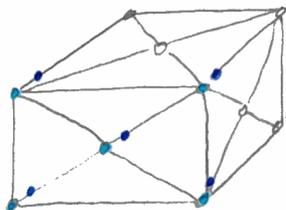
Diamant:



C, Si

Gitterkoordinater: $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Baskoordinater: $(0,0,0)$ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$



- $(0,0,0)$
- $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

Baskoordinater för diamant (var atomens sätter)

Reella rummet \leftrightarrow reciproka rummet

Eftersom kristallen är periodiska är det intressant att "studera" ett "inverterat" rum (jmf. Fourieranalys). Låt \vec{a}_1 , \vec{a}_2 och \vec{a}_3 vara gittervektorer i reella rummet. De reciproka gittervektorerna kallar vi \vec{b}_1 , \vec{b}_2 och \vec{b}_3 , där

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

$$V = V_{\text{cell}} = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|$$

- Enheten i det reciproka rummet är m^{-1}
- En gitterpunkt i reciproka rummet motsvarar en planskara i reella rummet.

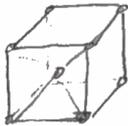
$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

- För plan med Miller index (hkl) , med normal \vec{n}_{hkl} , gäller:

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

- BCC i reella rummet blir FCC i reciproka rummet. (Härleds senare)
- FCC i reella rummet blir BCC i reciproka rummet.
- Vägvektorer med $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$ beskriver strålar (t.ex. röntgen, elektroner) i reciproka rummet.

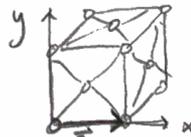
Reella



BCC

FCC

Reciproka

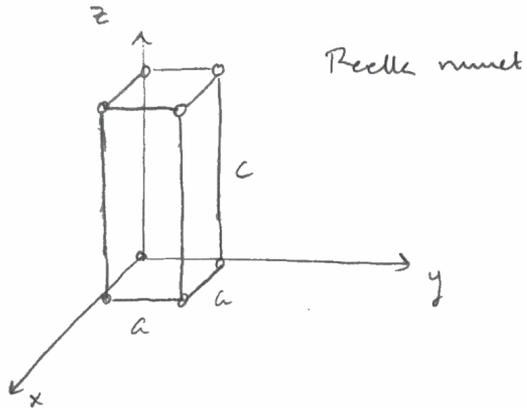


FCC

BCC

Ex:

Reciproka gitteret för en enkel tetragonal struktur i reella rummet

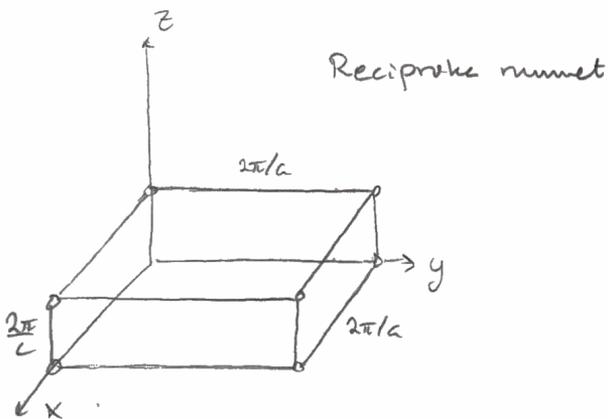


$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$
$$\vec{a}_2 = a\hat{y}$$
$$\vec{a}_3 = c\hat{z}$$
$$V_{\text{cell}} = a^2c$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^2c} \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^2c} \cdot \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^2c} \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{c} \hat{z}$$



Det reciproka gitteret är också tetragonalt men notera att läng och smäll i reella rummet blir kort och bred i reciproka rummet.

FÖRELÄSNING 3

23/1-20

Fourieranalys av kristaller

1 dimension (1D):

Låt $n(x)$ vara elektronstätheten och a gitterparametern (i reelle rummet)



Fourierserien blir:
$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} C_p \cos\left(\frac{2\pi p x}{a}\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi p x}{a}\right)$$

C_p och S_p är reella Fourierkoefficienter

Vi ser att: $n(x+a) = n(x)$, dvs. vi har translationsymmetri

Vi föredrar att använda det kompakta skrivsättet:

$$n(x) = \sum_p n_p e^{i2\pi p x/a} \quad ; \quad p \text{ heltal}$$

$n(x)$ är reell, koefficienterna n_p är komplexa

Vi ser att exponenten $\frac{2\pi p x}{a}$ är lika med x gånger en reciprok gittervektor.

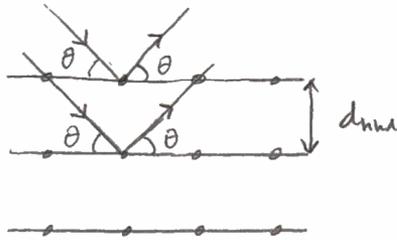
3 dimensioner beskrivs i föreläsninganteckningarna.

Diffraktion

Kristallstrukturen studeras i första hand med hjälp av diffraktion där $\lambda < a$. Detta kan göras med röntgen, elektroner och neutroner t.ex.

$$\lambda_{\text{röntgen}} = \frac{hc}{E} \quad ; \quad \lambda_{\text{elektroner, neutroner}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Reella rummet:



Kristallen betraktas som en stack av atomplan som i sig är delvis reflekterande. De reflekterade strålarna interfererar.

$$2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$$

Vi får konstruktiv interferens då Braggs lag är uppfylld:

Dessutom får vi villkor på hkl pga symmetrierna i kristallstrukturen (tas fram med strukturfaktorn).

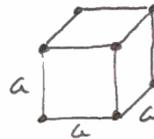
simple cubic

SC: inga villkor

BCC: $h+k+l = \text{jämnt tal}$

FCC: hkl alla udda eller jämna

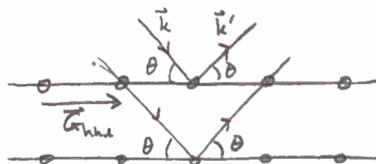
För kubisk enhetscell: $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$



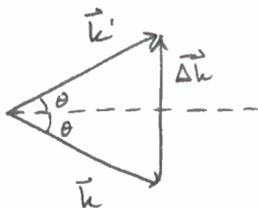
För ortorombisk enhetscell: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$



Reciproka rummet:



Vi studerar elastisk spridning vilket medför att $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$



$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{\Delta k}$$

Länge diffraktion

Vi postulerar att den spridda amplituden är proportionell mot den lokala elektrontätheten $n(\vec{r})$. Vi integrerar $n(\vec{r}) dV$ över kristallen och tar hänsyn till fas skillnad $e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}}$.

Spridningsamplitud: $F = \int n(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} dV = \int n(\vec{r}) e^{-i\vec{\Delta k} \cdot \vec{r}} dV$

Efternam $n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$ från Fourieranlys i 3D för vi:

$$F = \sum_{\vec{G}} \int n_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\cdot\vec{r}} dV$$

Detta är $\neq 0$ endast om $\Delta\vec{k} = \vec{G}$. Dä är $F = V n_{\vec{G}}$

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

Lagervilken för diffraktioner:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G}$$

$$\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$$

Notera också att $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$ där elastisk spridning ger $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ och då är:

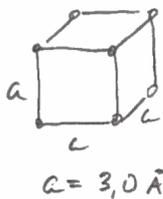
$$(\vec{k} + \vec{G})^2 = |\vec{k}'|^2$$

$$2\vec{k}\cdot\vec{G} + G^2 = 0$$

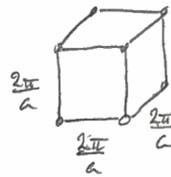
Ex:

En röntgenstråle träffar en SC-kristall, med $a = 3,0 \text{ \AA}$, med infallsriktningen $[1,0,0]$. Vilken våglängd krävs för att erhålla diffraktion från $(\bar{1}11)$ -planet?

Reella rummet:



Reciproka rummet:



$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} [1, 0, 0] \quad ; \quad \vec{G} = \Delta\vec{k} = \frac{2\pi}{a} [1, 1, 1] \quad (\vec{G} = h\vec{b}_1 + \dots)$$

$$\text{Laue-vilket ger: } \vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} = 2\pi \left[\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{a}, \frac{1}{a}, \frac{1}{a} \right]$$

$$\text{Elastisk spridning ger: } |\vec{k}'| = |\vec{k}|$$

$$|\vec{k}'|^2 = |\vec{k}|^2 \quad ; \quad 4\pi^2 \left(\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{a} \right)^2 + \frac{2}{a^2} \right) = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$$

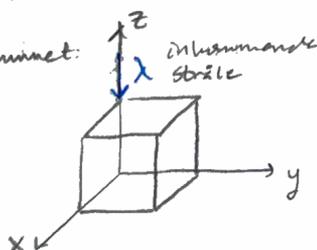
$$\Rightarrow \lambda = \frac{2a}{3} = \underline{2,0 \text{ \AA}}$$

Ewaldkonstruktionen

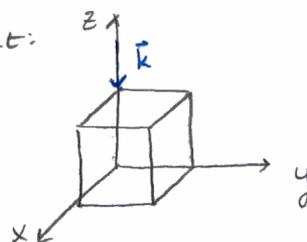
Geometrisk representation i reciproka rummet av diffraktioner.

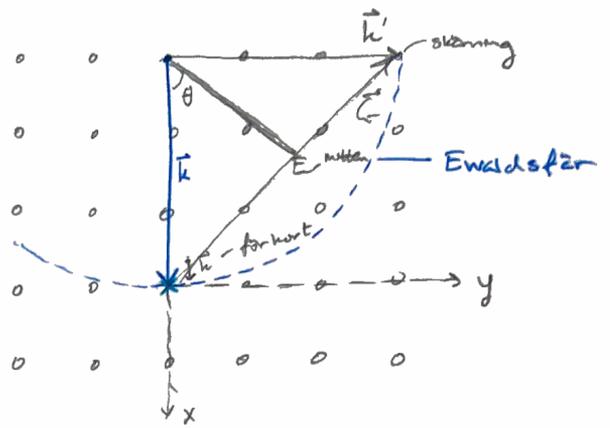
Vilken för diffraktion: $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$

Reella rummet:



Reciproka rummet:





1. Rita reciproka rummet med gitter.

2. Rita \vec{k} så att den slutar i origo. Pilens längd är $|\vec{k}|$ och riktning är korrekt i förhållande till gittret i reciproka rummet.

3. Rita en sfär med centrum i punkten där \vec{k} börjar.

4. När sfären skär en gitterpunkt uppfylls diffraktionsvillkoret och vi får en diffrakterad stråle.

Om \vec{k} är för kort fås ingen diffraktion.

Om \vec{k} är lång, $\gg |\vec{a}|$, blir sfären ett plan.

Atomära formfaktorn: f_j . Anger spridningen för atom j i enhetscellen.

Röntgen, elektron: $f \propto Z$

Strukturfaktorn: Anger spridningsamplituden för en cell. $S_{\vec{G}}$

$$F_{\vec{G}} = N \cdot S_{\vec{G}} \quad ; \quad S_{\vec{G}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j}$$

Spridd intensitet: $I_{\text{tot}} \propto N^2 |S_{\text{tot}}|^2$

F ÖRELÄSNING

4

17/1-20

farts.

PP: Elektronensitet: $n(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}_j} n_{\vec{r}_j} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}$

$$n_{\vec{r}} = \frac{1}{V_{cell}} \int_{cell} n(\vec{r}) e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} dV$$

Inkommande: $k = 2\pi/\lambda$

Diffraherade: k'

$$F = \int n(\vec{r}) e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} dV = \sum_{\vec{r}_j} \int n_{\vec{r}_j} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} dV$$

Atomär formfaktor

Struktur faktor

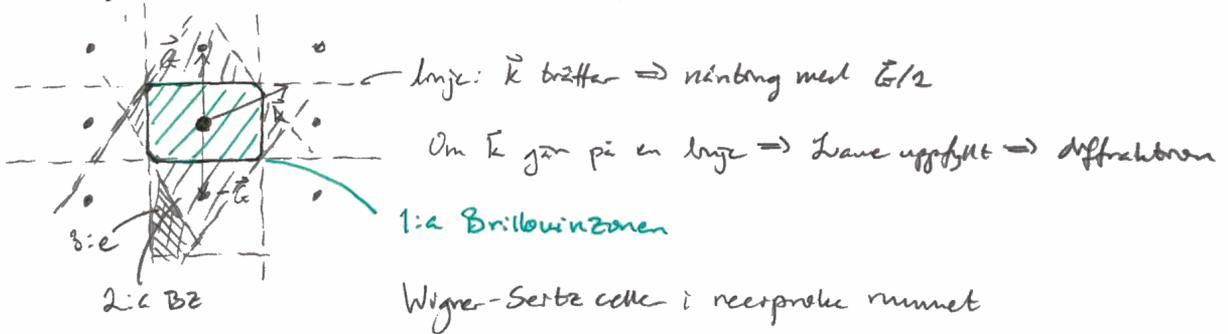
Brillouin zoner

Diffractionsvillkor från tidigare: $2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0$

\vec{G} reciprok vektor $\Rightarrow -\vec{G}$ reciprok vektor \Rightarrow Vi kan byta ut \vec{G} mot $-\vec{G}$

$$\vec{k} \cdot \left(\frac{\vec{G}}{2}\right) = \left(\frac{G}{2}\right)^2 \quad (*)$$

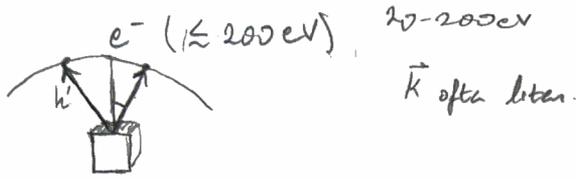
Detta har en geometrisk representation i reciproka rummet:



Vilkoret (*) är uppfyllt längs plan vinkelräta mot \vec{k} genom $G/2$. Ritar vi detta för alla \vec{G} fås Wigner-Seitz cell, fast i reciproka rummet. Denna kallas första Brillouin zonen (BZ). Vi kan också definiera 2:a, 3:e, ... Diffraction om \vec{k} på BZ-kant.

☺ e^- jag är en liten elektron med elektronbansspring (för liten undulakt)

Low Energy Electron Diffraction (LEED)



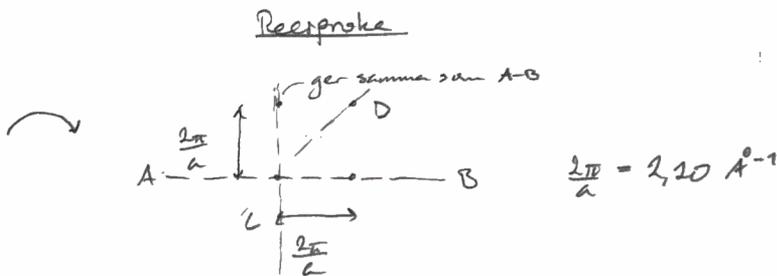
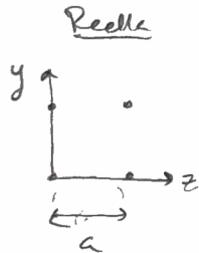
Ex:

I ett LEED-experiment kommer e^- med energin 50 eV mot en (100)-ytta i järn. Vilka vinklar, mätt mot normalen, har de diffrakterade strålarna?

OBS! Eftersom energin är låg kommer e^- endast att spridas mot ytan.
→ 2D diffraktion.

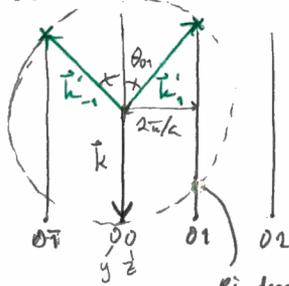
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{1,52}{E(\text{eV})}} \text{ nm} = 1,73 \text{ \AA}$$

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = 3,63 \text{ \AA}^{-1} \quad \text{PH} \rightarrow \text{Fe} \text{ är BCC med } a = 2,86 \text{ \AA}$$



\vec{k} vinkelrät mot pappret. Eftersom problemet är 2D finns inga diffraktionsvinklar i x-led. Detta gör att punkterna blir "stavar" i reesproke rummet (i x-led). Studera först planet/snittet A-B från sidan (gärna skalenligt). Ewaldsfer (bakåtspridning)

A-B planet sett från sidan



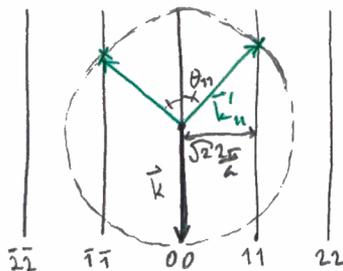
$$|\vec{k}| > 2\pi/a$$

$$\theta_{01} = \arcsin \frac{2,10}{3,63} = \underline{37,3^\circ}$$

4 sidare vinklar (planet vinkelrätt mot A-B ger 2 två)

ej dessa punkter, ty gör inakt.

C-D planet:



$$\theta_{11} = \arcsin \frac{\sqrt{2} \cdot 2,10}{3,63} = \underline{59^\circ}$$

4 sidare vinklar (planet vinkelrätt mot C-D ger 2 två)

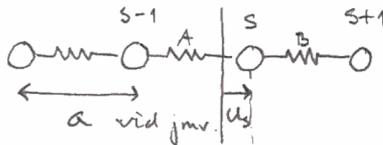
Kristallvibrationer

Gittervibrationer - fononer

- * Värmekapacitet
- * Värmeledning
- * Med vilka frekvenser kan gittret svänga?

En oändlig kedja av atomer

Antag att liksdana atomer är sammankopplade i 1D med fjädrar, med fjäderkonstant C .



Låt u_s beteckna avvikelsen från jämviktsläget för atom s .
Antag att endast de närmaste grannarna påverkar varandra.

Kraften på s från fjäder A: $F_A = C(u_{s-1} - u_s) \rightarrow$ positivt

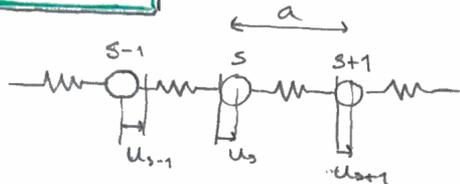
Kraften på s från fjäder B: $F_B = C(u_{s+1} - u_s)$

$F_s = F_A + F_B = C(u_{s-1} + u_{s+1} - 2u_s) \dots$ fortsättning följer...

FÖRELÄSNING 5

29/1-20

forts.



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

Newton's 2:a lag ($ma = F$): $M \frac{du_s^2}{dt^2} = C(u_{s-1} + u_{s+1} - 2u_s)$ (1)

Vi antar en våglösning:

$$u_s = u e^{i(ksa - \omega t)}$$

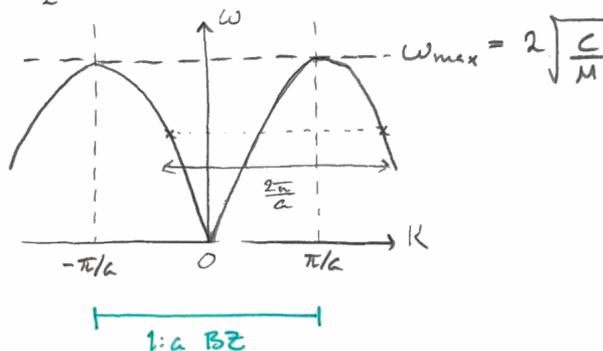
k motsvarar k för gitteret. k för inkommande strålar

Insättning i (1) ger:

$$-M\omega^2 e^{iks} = C e^{iks} (e^{ika} + e^{-ika} - 2)$$

$$\cos x = \frac{1}{2}(e^{ix} + e^{-ix}), \quad \sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x) \quad \Rightarrow$$

$$\omega(k) = 2 \sqrt{\frac{C}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$



Detta kallar vi dispersionsrelation:

Små k : $\omega(k) = a \sqrt{\frac{C}{M}} k$ $\text{long } \lambda$

(som vanligt för vågor)

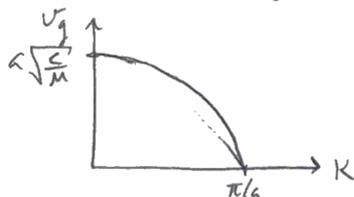
Stora k : ω ökar inte med k , utan vi har en maxgräns $\omega_{\max} = 2 \sqrt{\frac{C}{M}}$ kort λ .

Vi ser att det relevanta k -området är från $-\frac{\pi}{a}$ till $\frac{\pi}{a}$, dvs. 1:a BZ. (Wikipedia/phonon)

Eftersom vi endast är intresserad av utslag i atomernas position, kan för stora k -värden återföras till 1:a BZ.

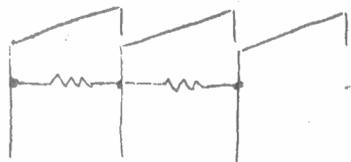
$$k = k_{\text{BZ}} + m \frac{2\pi}{a}; \quad m \text{ heltal} \quad \frac{2\pi}{a} = "G"$$

Från vågfysik vet vi att energitransport sker med gruppshastighet $v_g = \frac{d\omega}{dk} = a \sqrt{\frac{C}{M}} \cos \frac{ka}{2}$



Om $k = \frac{\pi}{a} \rightarrow v_g = 0$ och vi har en stående våg.

Vår 1D analys liknar 3D om vi ser det som plan som svängen.

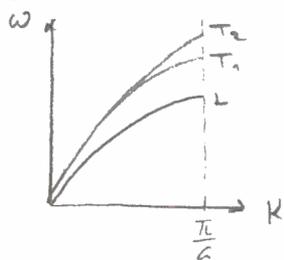


Vi har hittills studerat longitudinella vågor men vi kan också ha transversella vågor, i två ortogonala riktningar.

En longitudinell: \vec{k}

Två transversella: \vec{k}

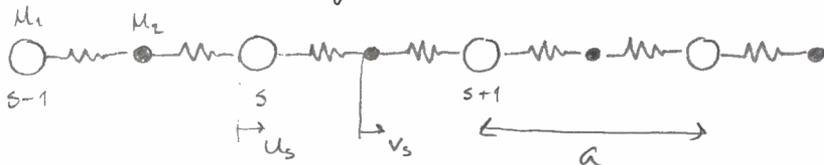
Vi säger att vi (i 3D) får tre grenar i dispersionsrelationen. Ibland är dessa degenererade (överlappar).



T_1 och T_2 (transversella)
degenererade i början

En oändlig kedja med två atomer i basen

På samma sätt som tidigare fast med M_1 och M_2

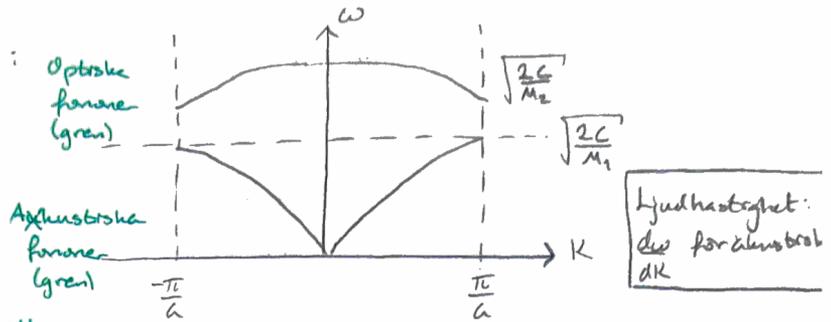


$$\begin{cases} M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \\ M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \end{cases} \quad \text{Vi antar:} \quad \begin{cases} u_s = u e^{i(kx_s - \omega t)} \\ v_s = v e^{i(kx_s - \omega t)} \end{cases}$$

Detta gör att lösa och ger dispersionsrelationen:

$$\omega^2 = c \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm c \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{ka}{2} \right]^{1/2}$$

Vi får två lösningar (grenar):



$$\omega_{\text{optisk max}} = \omega_{\text{optisk}}(0) = \sqrt{2c \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$$

Små k , akustiska grenen: $\omega_{\text{akustisk}} = \sqrt{\frac{c^2}{M_1+M_2}} ak$

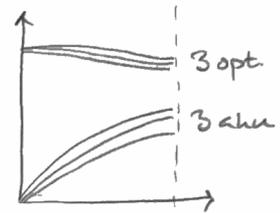
I den optiska grenen rör sig M_1 och M_2 i motsatta riktningar.



Fundera på vad som händer då $M_2 \rightarrow M_1$. $c \rightarrow \frac{c}{2}$

I 3D får vi longitudinella och transversella svängningar.

Med p atomer i basen fås $N=3p$ grenar, 3 akustiska och resten optiska.



Inelastisk spridning

$$\vec{k} + \vec{\epsilon} = \vec{k}' + \vec{k}_{\text{IBZ}}$$

Den totala energin bevaras ($\vec{\epsilon}$ får ingen energi).

För fotoner: $\omega = \omega' \pm \omega_k$

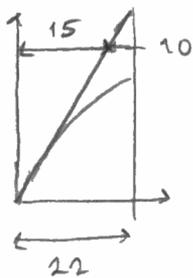
För neutroner: $\frac{\hbar k^2}{2M_n} = \frac{\hbar k'^2}{2M_n} \pm \omega_k$

Uppgift 2 Dugga 2017

a) Ljudhastigheten ges av $v = \frac{dw}{dk}$ för små k . Titta på lutningen nära Γ .
Vi behöver skalan i x-led

PH: Fe BCC, punkten H = $\frac{2\pi}{a} (1,0,0)$; $|K_H| = \frac{2\pi}{a}$; $a = 2,87 \text{ \AA}$

Anpassa en rät linje: $v \approx \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{2\pi\Delta f}{\Delta k} = \{ \text{mät i figur} \} = \frac{2\pi \cdot 10 \cdot 10^{12}}{\frac{15}{22} \cdot \frac{2\pi}{2,87} \cdot 10^{10}} = 4,2 \text{ km/s}$



FÖRELÄSNING 6

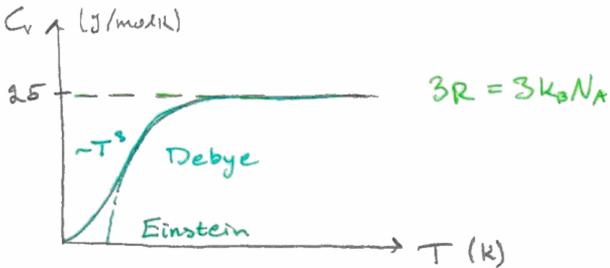
30/1-20

Termiska egenskaper

Värmekapacitet

Def: $C_v = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_v$

Experiment och modeller



o För höga T: C_v är konstant $C_v = 3k_B N_A = 3R = 25 \text{ J/molK}$ (Dulong-Petit)

o För metaller vid låga T: $C_v = \alpha T + \beta T^3$
elektronen gitter

o Klassisk statistisk fysik (ekvipartitionsprincipen) säger att $U = 3k_B N_A T \rightarrow C_v = 3k_B N_A$ (tre frihetsgrader och två kvadratiske termer $\rightarrow 6 \cdot \frac{1}{2} k_B T$ per atom).

Vi behöver en bättre approach:

- Plancks fördelningsfunktion applicerad på gittersvängningar.
- Kvantiserade energinivåer \rightarrow Einsteins modell.
- Tillföra K-värden (ändring kristall).
- Tillståndstäthet (density of states) \rightarrow Debyes modell.

Terminologi: Svängning med vågvektor $\vec{k} = \text{svängningsmod} = \text{mod (mode)} = \text{tillstånd (state)}$

Kvantiserade energinivåer:

Energien för gittersvängningar är kvantiserad (jämför EM-fält och fotoner): Energin för en mod med vinkelfrekvens ω är:

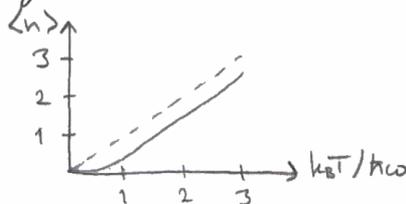
$$E_n(\omega) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

där n är ett kvanttal som säger hur många fononer det finns i moden. En excitation $\Delta E = \hbar \omega$ motsvarar en fonon.

Planckfördelning:

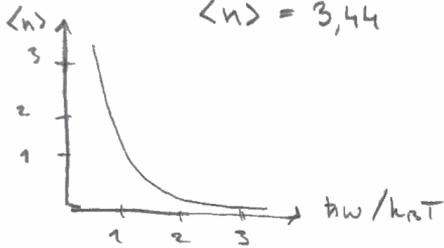
Vi är intresserade av temperaturberoendet hos kristallens svängningsenergi. Eftersom fononen är bosoner (Pauliprincipen gäller ej) ges medelvärdet av kvanttalet n för en harmonisk oscillator av:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$$



För $\hbar\omega/k_B T > 1$ blir $\langle n \rangle \approx \frac{\hbar\omega/k_B T - 1}{2}$ (1)

Med t.ex. $\omega = 10^{13} \text{ s}^{-1}$ och $T = 300 \text{ K}$ blir $\frac{\hbar\omega/k_B T}{\hbar\omega} = 3,92$ och $\langle n \rangle = 3,44$

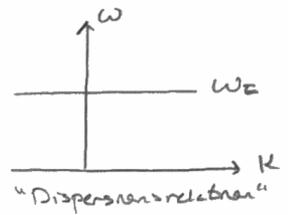


Einsteinmodellen:

Betrakta en mol, N_A , oberoende harmoniska oscillatorer med samma vinkelfrekvens ω_E .

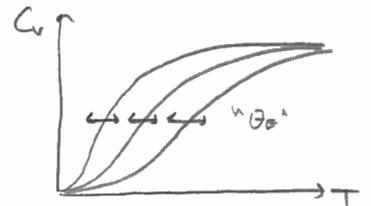
$\langle U \rangle = 3N_A \left(\langle n \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_E$
↑ antal frihetsgrader

Med planckuttrycket fås: $\langle U \rangle = 3N_A \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_E$



$C = \frac{\partial \langle U \rangle}{\partial T} = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}$

Vid höga T fås $C = 3k_B N_A$ (Dulong-Petit) (med (1)).
 ω_E måste anpassas efter experiment.



$\theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$ kallas Einsteintemperaturen. (Olika för olika ämnen)

Vid låga T ($< 10-50 \text{ K}$) går C för snabbt mot noll. Orsak: den lägsta excitationsenergin ($\hbar\omega_E$) är för stor, så U blir konstant $\rightarrow C \approx 0$.

Tillåtna k -värden:

Vi har tidigare behandlat en oändligt lång kedja atomer \rightarrow dispersionsrelation. Om vi har en kedja med längd L , måste vi införa randvillkor.

Alternativ 1: Första och sista atomerna sitter fast. Vi skulle få stående vågor.

Alternativ 2: Periodiska randvillkor: $u(x_0) = u(x_0 + L)$

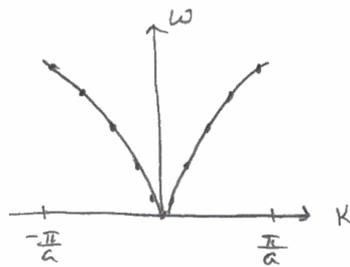
$u_0 e^{i(kx_0 - \omega t)} = u_0 e^{i(kx_0 + kL - \omega t)} \rightarrow e^{ikL} = 1$

$\Rightarrow k = \frac{2\pi}{L} m$; $m = \text{helvtal}$

$\circ \circ k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm |k_{max}| = \pm \frac{2\pi}{L} m_{max} \leq \frac{\pi}{a}$ ↑ 1:a

Avståndet mellan två tillåtna k -värden är $\frac{2\pi}{L}$ 2D: $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$; 3D: $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$

Ex:



$$\Delta k = \frac{\pi}{5a} \quad ; \quad m_{\max} = 5$$

$$\begin{aligned} \text{Antal tillåtna } k\text{-värden} &= 11 = \\ &= 2m_{\max} + 1 = \text{antal atomer} \end{aligned}$$

I 3D får vi på motsvarande sätt. Antag att vi har en kub med $V=L^3$, med N_0^3 celler. Då blir $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, där

$$k_x = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N_0\pi}{L}$$

$$k_y = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N_0\pi}{L}$$

$$k_z = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm \frac{N_0\pi}{L}$$

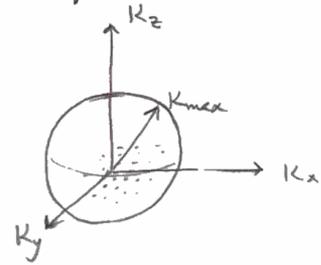
I \vec{k} -rummet finns det ett värde per $(\frac{L}{2\pi})^3$.

Det finns alltså $(\frac{L}{2\pi})^3$ tillåtna \vec{k} per enhetsvolym i \vec{k} -rummet.

OBS: Vi har bara tittat på en gren. Har vi tre grenar i dispersionsrelationen blir det 3 ggr fler k -värden. (inga optiska)

Antal tillåtna k -värden (N_k) med $\vec{k} < k_{\max}$ blir:

$$N_k = \frac{4\pi k_{\max}^3}{3} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \Rightarrow N_k = \frac{L^3 k_{\max}^3}{6\pi^2}$$



FÖRELÄSNING

3/2-20

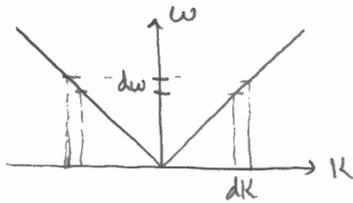
Tillståndstäthet: (DOS)

1D: I första BZ finns det $\frac{L}{2\pi}$ k -värden per enhetslängd k . Det betyder att DOS ($D(k)$) är

$$D(k) = \frac{L}{2\pi} ; -\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

Totala antalet tillstånd: $N_k = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} D(k) dk = \frac{L}{a} = N - 1 \approx N$; $N = \#$ atomer

Vi behöver också DOS i ω :



$$D(\omega) = 2D(k) \cdot \frac{dk}{d\omega} = \frac{L}{\pi} \cdot \frac{1}{v_g}$$

3D: $D(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{L^3}{8\pi^3} = \frac{V}{8\pi^3}$; $N_k = \frac{L^3 k^3}{6\pi^2}$, antal tillstånd med $|k| < k$

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

OBS: Detta gäller för en gren.

Alternativ: $D(N)dN = dN = D(\omega)d\omega = D(k)d^3k$

$$D(\omega) = D(k) \frac{d^3k}{d\omega} = \frac{L^3}{8\pi^3} \underbrace{4\pi k^2}_{\text{yta av sfär}} \frac{dk}{d\omega} = \frac{L^3 k^2}{2\pi^2} \frac{dk}{d\omega}$$

Debyes modell:

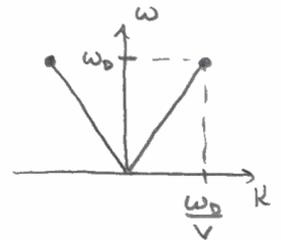
1) Antag att $\omega = vk$ (som för akustiska fononer med litet k).

2) Antag $\omega_{max} = \omega_0$

3) Använd Planckfördelningen $\langle n(\omega) \rangle$

4) Använd DOS för tre grenar (1L + 2T).

$$D(\omega) = 3 \cdot \frac{L^3 k^2}{2\pi^2} \frac{dk}{d\omega} = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} ; 0 \leq \omega \leq \omega_0$$



5) Energi: $U = \int_0^{\omega_0} D(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar \omega d\omega$ Vi bortser från $\frac{1}{2}\hbar\omega$ i $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

$$u = \int_0^{\omega_D} \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3} \cdot \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega$$

Man brukar införa Debyetemperaturen: $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$

Vi utser strax: $\theta_D = \frac{\hbar k}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (2)$

Med $x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} = \frac{\theta_D}{T}$ blir $u = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$

För höga T: $C_V = \frac{2u}{2T} = 3Nk_B$

För låga T: $C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \sim T^3$

Ex:	$\theta_D (\text{Pb}) = 105 \text{ K}$	$\theta_D (\text{Si}) = 645 \text{ K}$
	$\theta_D (\text{Cu}) = 343 \text{ K}$	$\theta_D (\text{Diamant}) = 1860 \text{ K}$

Hårt bundna ämnen

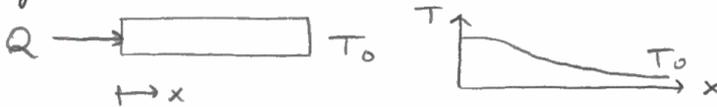
Ekvation (2) kommer av:

$$3N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3} d\omega = \frac{3V\omega_D^3}{6\pi^2v^3} \quad ; \quad \omega_D = \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

$$\theta_D = \frac{\hbar k}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

Värmeledning

Antag att en stav värms i ena änden med Q och hålls vid T_0 i andra änden.



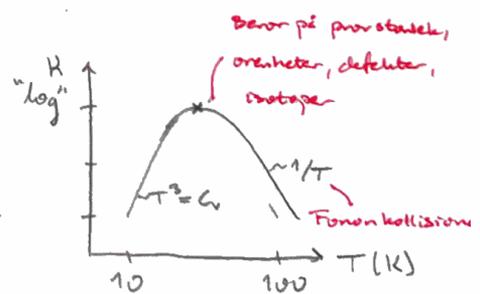
κ [W/mK] = värmeledningsförmåga = termisk konduktivit

Värmeflödet j [W/m²] ges av: $j = -\kappa \frac{dT}{dx}$ vid steady-state

Värmeledning ges av både gitter och e^- : $\kappa_{tot} = \kappa_k + \kappa_{e^-}$

$$\kappa_k = \frac{1}{3} C_V \langle v \rangle l$$

Värme leds som om fononerna vore gasmolekyler som krockar med varandra. - förklaras.



- C_V = värmekapacitet
- $\langle v \rangle$ = fononernas medel-hastighet
- l = fri medelväglängd

För gitternets bidrag fås:

Låga T : κ ökar som C_v (mer energi per fonon)

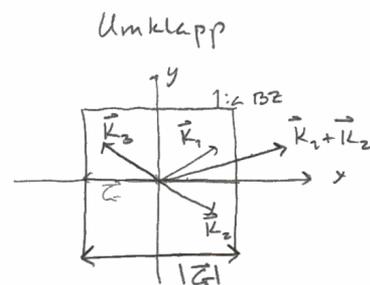
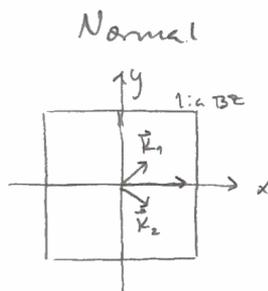
- spridning mot defekter, ytor, föroreningar, "isotoper"

Höga T : Fononer sprids mot varandra så att deras fria medelväglängd blir kort
 $\Rightarrow \kappa$ minskar med T .

Om två fononer interagerar fås två fall:

I: Normal: $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3$, \vec{k}_3 i 1:a BZ

II: Umklapp: $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{G}$, \vec{G} gör så att \vec{k}_3 i 1:a BZ.



Vid umklapp ändras riktningen mycket \rightarrow minskad värmeledningen.

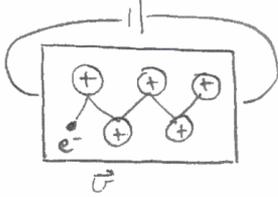
F ÖRELÄSNING 8

6/2-20

Elektroner i material

Drudemodellen

Klassisk bild på elektroner i material. 1900.



Rörelseekvation: Newton II:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}; \quad \vec{F} = -e\vec{E} - m \frac{\vec{v}}{\tau}$$

τ : kollisionskonstant, relaxationstid
 Lorentzkraft ($\vec{B}=0$)

Behåns båda termerna?

- Utan dämpning: $m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} \rightarrow \vec{v} = \vec{v}_0 - \frac{e}{m} \vec{E} t$
växer! (Negativt)
- Utan fält: $m \frac{d\vec{v}}{dt} = -m \frac{\vec{v}}{\tau} \rightarrow \vec{v}(t) = \vec{v}_0 e^{-t/\tau}$
partikeln "stannar" efter en tid

Antag konstant flöde i genomsnitt:

$$\frac{d\vec{v}_x}{dt} = 0 \quad \vec{v}_x = \langle \vec{v} \rangle$$

$$0 = \frac{d\vec{v}_x}{dt} = -e\vec{E} - m \frac{\vec{v}_x}{\tau} \Rightarrow \text{Drifhastighet: } \vec{v}_x = -\frac{e\tau}{m} \vec{E}$$

Strömstäthet: $\vec{j} = (\text{tätet av } e^-) \cdot (\text{laddning per } e^-) \cdot (\text{hastighet}) =$
 $= n \cdot (-e) \cdot \left(-\frac{e\tau}{m} \vec{E}\right) = \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E}$

Drudekonduktiviteten: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$

$\therefore \vec{E} = \sigma^{-1} \vec{j}$ Jmf. "U=R·I"
 $\rightarrow \vec{j} \cdot \vec{A} = I$

Värmekapacitet

Klassisk partikel: $\frac{1}{2} k_B T$ per frihetsgrad

Drudeelektroner: $\langle \frac{\text{energi}}{\text{elektron}} \rangle = \langle \frac{1}{2} m \vec{v}^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T$

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_V = \frac{3}{2} k_B \text{ per } e^-$$

1 mol joner, 1 mol elektroner. $C_V^{\text{jon}} = 3k_B$, $T > T_{\text{Debye}}$

$$C_V / \text{mol} = \underbrace{N_A \cdot 3k_B}_{\text{joner}} + \underbrace{N_A \cdot \frac{3}{2} k_B}_{\text{elektroner}} = 3R + \frac{3}{2}R = \underline{4,5R}$$

Drudevärmekapacitet

Men experiment: Dulong-Petits lag $C_V \approx 3R$

\Rightarrow Elektroner tar upp försumbart lite energi! Endast jonerna bidrar

Drudemodellen för värmekapacitet fallerar: \downarrow

När för: Edelbrongasen är en kvantgas.

Fria elektronmodellen

Elektroner som kvantgas.

S.E. för fri partikel ($\vec{V}(\vec{r}, t) = 0$): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t)$ ($\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$)

Lösningar: $\Psi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - \omega t)} = \dots e^{i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{r} - \epsilon t)}$

Energi: $\epsilon = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $k = |\vec{k}|$



Tag stor box, periodiska randvillkor:

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

$$e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = e^{i(k_x(x+L) + k_y y + k_z z)} \Rightarrow e^{ik_x L} = 1$$

Ans. $k_x = \frac{2\pi \cdot \text{heltal}}{L} \Rightarrow$

$$\lambda_x = \frac{2\pi}{k_x} = \frac{L}{\text{heltal}}$$

våglängd

våglängd

Fas hastighet: $v_f = \frac{\omega}{k}$

Kvanttillstånd för elektroner:

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$$

heltal!

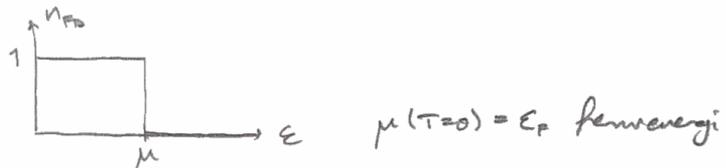
Spin \uparrow eller \downarrow

Energi utan magnetfält: $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ **OBS:** Fermioner \Rightarrow Pauliprincipen \Rightarrow 1 e^- per tillstånd

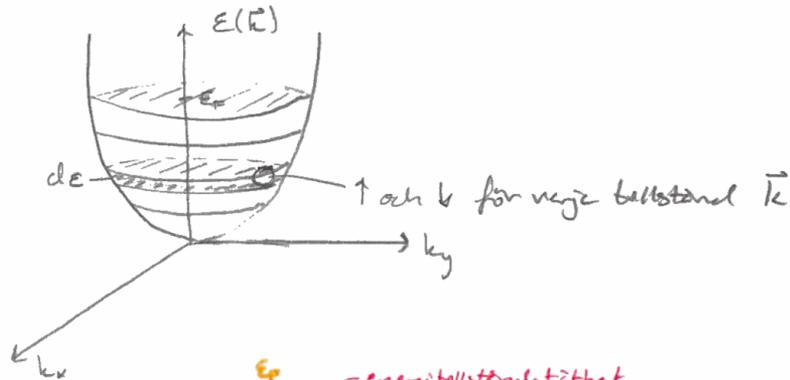
Väntevärdet av antal elektroner i tillstånd \vec{k} (gänger 2 för spin):

Fermi-Dirac-fördelning: $n_{FD} = \frac{1}{e^{(E_{\vec{k}} - \mu)/k_B T} + 1}$ μ : kemisk potential

$T=0$: $n_{FD}(E) = \begin{cases} 1, & E < \mu \\ 0, & E > \mu \end{cases}$



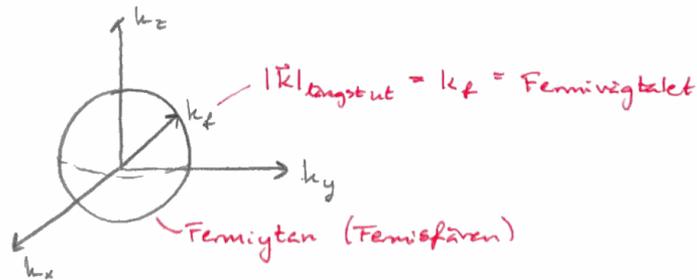
2D-skiva:



Totalt antalet elektroner: $N = \int_0^{E_F} D(E) dE$

\uparrow energi: tillståndstätt
 \uparrow Antal tillstånd i $[E, E+dE]$

I k-rummet:



$$E_{\vec{k}} = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \Rightarrow \boxed{k_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m E_F}}$$

Avstånd mellan tillstånd: $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L} = \Delta k_y = \Delta k_z$

fortf. $T=0$, k -rummet:

I liten volym $d^3k = dk_x dk_y dk_z$ finns $2 \cdot \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ tillstånd

Tillståndstäthet $D(k) d^3k = 2 \cdot \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Rightarrow D(k) = \frac{V}{4\pi^3}$ inuti Fermisfären

Antal tillstånd inom radie k' :

$$N' = \int_0^{k'} D(k) d^3k = \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{k'} d^3k = \frac{V}{4\pi^3} \cdot \frac{4\pi}{3} (k')^3 = \frac{V}{3\pi^2} (k')^3$$

$$k' = k_F \Rightarrow k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

\uparrow e⁻-täthet

$$\text{Dvs: } E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \Rightarrow \boxed{E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}} \quad v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$$

$$\text{Fermitemperatur: } T_F = \frac{E_F}{k_B} \sim 10^5 \text{ K}$$

FÖRELÄSNING 9

10/2-20

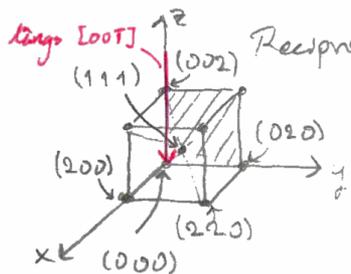
Diffraction

Ewaldkonstruktionen

Ex:

En guldkristall undersöks med diffraction. Resultat erhålls från både röntgen- ($Cu_{K\alpha}$) och elektron (200 keV) spridning. Strålarna faller in längs $[00\bar{1}]$ -riktningen. Rita Ewaldsfären för de två fallen.

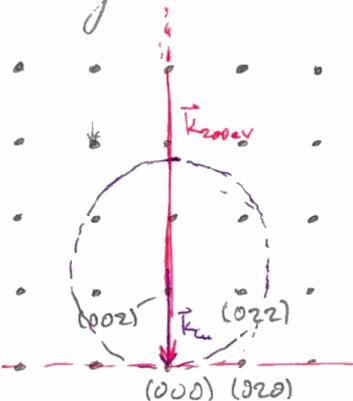
Au: $a = 4,08 \text{ \AA}$, FCC-struktur \rightarrow BCC-gitter i reesproka rummet



Reesproka rummet (Rita Ewaldsfär i skuggat plan.)

Miller index från reella rummet

Infall längs $[00\bar{1}]$ -riktningen



Bestäm $|k|$ för de två fallen:

$Cu_{K\alpha}$ -strålning: $\lambda = 1,54 \text{ \AA} = 154 \text{ pm}$

$$|k| = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ pm}^{-1}$$

200 keV e^- : $\lambda = 2,51 \text{ pm}$

$$|k| = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ pm}^{-1}$$

$$|\vec{k}_{020}| = \frac{2\pi}{\sqrt{0^2+2^2+0^2}} = \frac{2\pi}{204 \text{ pm}}$$

$$\frac{|\vec{k}_{Cu}|}{|\vec{k}_{020}|} = \frac{204}{154} \quad \frac{|\vec{k}_{200keV}|}{|\vec{k}_{020}|} = \frac{204}{251}$$

$= 1,32 \leftarrow$ # punkter i gittret som motsvarar $|k|$

\rightarrow 1,32 punkter för $Cu_{K\alpha} \rightarrow k$, 81,27 punkter för $e^- \rightarrow k$.

Struktur faktorn

Spridningsamplituden för $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$ om vi har N enhetsceller i kristallen blir

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

$S_{\vec{G}}$ kallas struktur faktorn och ger spridningsamplituden för en enhetscell. Låt f_j vara den atomära form faktorn som anger spridningen för atom j i enhetscellen.

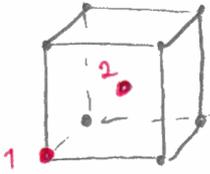
$$S_{\vec{G}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

Summan beräknas över de j atomerna med position \vec{r}_j i enhetscellen. Termen $e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$ motsvarar ett fas skillnad mellan atomerna i enhetscellen. För röntgen- och e^- -diffraction är $f \propto Z$, Z atomnumret. För neutron diffraction är f specifikt för varje isotop.

Den spridda intensiteten: $I_{hkl} \propto N^2 |S_{hkl}|^2$

Ex: Beräkna strukturfaktorn för BCC (reella rummet).

Den konventionella enhetscellen innehåller två atomer:



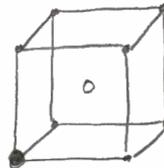
$$\vec{r}_1 = (0, 0, 0) ; \quad \vec{r}_2 = \frac{1}{2} \vec{a}_1 + \frac{1}{2} \vec{a}_2 + \frac{1}{2} \vec{a}_3 = \frac{a}{2} (1, 1, 1)$$

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

$$S_{\vec{G}}(v_1, v_2, v_3) = \sum_{j=1}^2 f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} = f_1 + f_2 e^{-i\pi(v_1+v_2+v_3)} = \{f_1 = f_2\} =$$

$$\text{BCC: } S_{\vec{G}} = \begin{cases} 2f, & v_1+v_2+v_3 = \text{jämnt tal} \\ 0, & v_1+v_2+v_3 = \text{udda tal} \end{cases}$$

Ex: CsCl. Här har vi enhetscellen

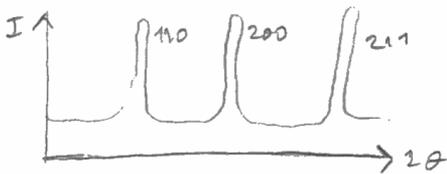


- Cs
- Cl

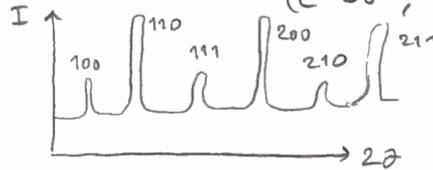
$$S_{\vec{G}}(v_1, v_2, v_3) = \begin{cases} f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}}, & v_1+v_2+v_3 = \text{jämnt} \\ f_{\text{Cs}} - f_{\text{Cl}}, & v_1+v_2+v_3 = \text{udda} \end{cases}$$

För väntgen och elektroner: $f \propto Z$

$$f_{\text{Cs}} = C \cdot 55, \quad f_{\text{Cl}} = C \cdot 17 \quad \Rightarrow \quad S_{\vec{G}} = \begin{cases} C \cdot 72, & \text{jämnt} \\ C \cdot 38, & \text{udda} \end{cases}$$



BCC



Kristalldefekter

Kristaller är nästan aldrig perfekta. De flesta innehåller defekter. Dessa har stor inverkan på kristallens/materialets egenskaper, t.ex. Nobelpris i fysik 2014. Defekter har olika dimensioner och strukturer från 0D till 3D.

Punktdefekter (0D)

En föroreningsatom eller en vakans är exempel på punktdefekter. Mängden vakanser, n/N , vid jämvikt ges av:

$$n/N = e^{-E_v/k_B T},$$

där E_v är vakansens bindningsenergi. Uttrycket säger att mängden vakanser ökar med ökande temperatur.

Schottky-defekt: En atom flyttas till ytan och lämnar en vakans i kristallen.

Frenkel-defekt: En atom flyttas till en position mellan ordnade atompositioner i kristallen. Resultatet är en vakans och en interstitial.

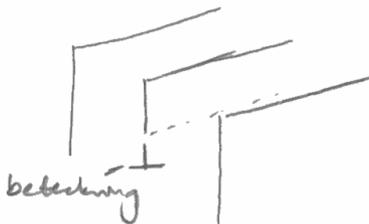
I jonkristaller är laddningsneutralitet viktigt. Detta innebär t.ex. att en Ca^{2+} i en KCl-kristall bildar ett par med en K^+ -vakans.



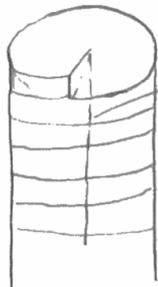
Dislokationer (1D)

Dislokationer är linjedefekter.

1) **Kantdislokation:** Ett atomplan sträcker sig bara delvis genom kristallen.



2) **Skrivdislokation:**



Dislokationslinje för skrivdislokation

F ÖRELÄSNING 10

17/2-20

Översikt modeller

Drude: Klassisk

Ohms lag?

ok!

C_V ?

Fel

Isolatorer?

Frei-elektron: Kvantfysik
endast e^-
kring E_F

ok!

ok!

Fel

e^- i periodiska gitter:
Kvant inklusioner
effekter av joner

Frä elektronmodellen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\text{Energi: } E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad k = |\vec{k}|$$

Tillstånd: $k \leq k_F$ Fermielektron fulla
 $k > k_F$ tomma } $\rightarrow T=0$

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

$$n = \text{elektron täthet} \Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$\text{Metall: } n \sim 10^{30} / \text{m}^3 \Rightarrow k_F \sim 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$\text{Reciproke gitteravståndet: } \frac{2\pi}{a} \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$$

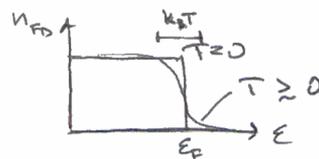
I k -rummet:

Antal tillstånd i intervall dE kring E :

$$D(E)dE = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F^{3/2}} \sqrt{E} dE$$

$$\text{Fermi-Dirac: } n_{FD} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

$$\text{Fermitemperatur: } T_F = \frac{E_F}{k_B} \sim 10^5 \text{ K}$$



Värmekapacitet

$$T \neq 0, T \ll T_F, \text{ då: } \mu(T) \approx \mu(T=0) = E_F$$

$$n_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - E_F)/k_B T} + 1}$$

Vilken extra energi?

$$\begin{aligned} \Delta E &= E(T) - E(T=0) \approx (\# e^- \text{ i bredden } k_B T) \cdot (\text{termisk energi per } e^-) \approx k_B T D(E_F) \frac{3}{2} k_B T = \\ &= (k_B T)^2 \frac{3}{2} \cdot \frac{3}{2} N \frac{\sqrt{E_F}}{E_F^{3/2}} = \frac{9}{4} k_B N \frac{T^2}{T_F} \end{aligned}$$

Värmekapacitet:

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{9}{4} k_B N 2 \cdot \frac{T}{T_F}$$

$$\text{Per mol: } C_V = \frac{9}{2} R \frac{T}{T_F} \leftarrow T \ll T_F \Rightarrow \text{i fria } e^- \text{-modellen}$$

2n e^- :s bidrag till C_V väldigt stort!
PRECIS SOM VE VILL

$$\text{Exakt: } C_V = \frac{\pi^2}{2} R \frac{T}{T_F}$$

Med gitterets effekt: $C_V = \gamma T + AT^3$ eller

$$\frac{C_V}{T} = \gamma + AT^2$$

Ohms lag

Antag att \vec{E} konstant

$$\text{Newton II: } (\vec{p} = 0) \quad m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$

Tåg τ bröskala: $\hbar \frac{d\vec{k}}{\tau} = -e\vec{E} \Rightarrow d\vec{k} = -\frac{e\tau}{\hbar} \vec{E}$ Alla \vec{k} har flyttats samma $d\vec{k}$

Hastighet: $m\vec{v} = \hbar d\vec{k} \Rightarrow \vec{v} = \frac{\hbar}{m} d\vec{k} = \frac{\hbar}{m} \left(-\frac{e\tau}{\hbar}\right) \vec{E} = -\frac{e\tau}{m} \vec{E} = \text{konstant}$

Elektriska strömstätheten:

$$\vec{j} = nq\vec{v} = n(-e)\left(-\frac{e\tau}{m}\vec{E}\right) = \underbrace{\left(\frac{ne^2\tau}{m}\right)}_{\text{konduktivitet}} \vec{E}$$

⇒ Ohms lag okej!

Från elektronmodellen → alltid metall!

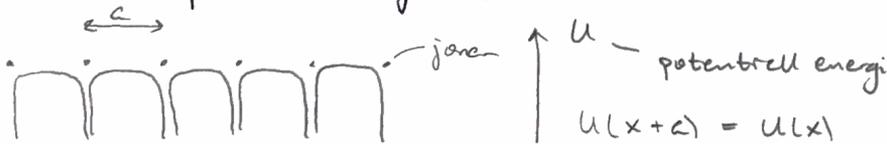
Litet \vec{E} ⇒ Litet \vec{k} ⇒ Liten ström dvs metall

Isolatorer? Vill ha $\sigma=0$ ättnare vid $T=0$

Hur ätgärder? Tag hänsyn till återgivret.

Behöver jonernas potential.

Elektroner i periodiskt gitter



Från e^- : $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \dots e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$

e^- i stor box L : $k_x = \frac{2\pi}{L}$ - heltal

Elektroner i periodisk potential

Bloch's teorem: $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r})$
lilla u
periodisk ⇒ $U_{\vec{k}}(x+a) = U_{\vec{k}}(x)$

Bevis: $U(x) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} U(q) = \{\text{periodisk}\} = U(x+a) = \int \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x+a)} U(q)$

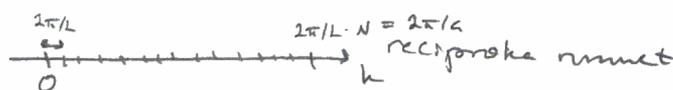
dvs. $e^{iqa} = 1 \Rightarrow q = \frac{2\pi}{a}$ - heltal

dvs. $U(x) = \sum_{\substack{q \in \\ \text{recip} \\ \text{gitter}}} U_q e^{iqx}$
ofta \vec{k}

$U(x)$ reell ⇒ $U_q = U_{-q}^*$

Elektroner: tidsberoende S.E: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$

Antag $U=0 \Rightarrow \Psi(x) = \dots e^{ikx}$, $k = \frac{2\pi}{L}$ heltal = $\frac{2\pi}{a}$ heltal



Fourierutveckla $\psi(\vec{r})$ i kuben: $\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{z}} U_{\vec{z}} e^{i\vec{z}\cdot\vec{r}} \quad \text{Sätt in i S.E.}$$

$$\text{Kinematisk: } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\text{Potential: } U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \left(\sum_{\vec{z}} U_{\vec{z}} e^{i\vec{z}\cdot\vec{r}} \right) \left(\sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) =$$

$$= \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} c_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} c_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\text{SE } \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} c_{\vec{k}'} \right) = 0$$

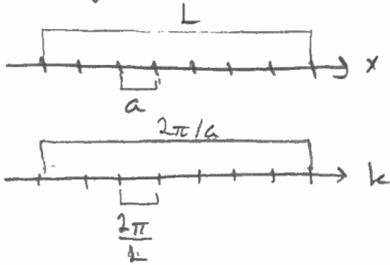
$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} c_{\vec{k}'} = 0 \quad \textcircled{A}$$

FÖRELÄSNING 11

21/2-20

- $U(x+a) = U(x)$ $\xrightarrow{\text{Fourier}}$ $U(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
- Fri elektron med rörelsemängdsmoment $\hbar k$ $\Psi(\vec{r}, t) = \dots e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$
- Lågg i stor periodisk box L , $k_x = \frac{2\pi}{L} \cdot \text{heltal}$
- Energi fri elektron: $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- $\Psi(\vec{r}) = \sum_{\substack{k_x \in \frac{2\pi}{L} \cdot \text{heltal} \\ k_y \\ k_z}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
- (A) $\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{z}} U_{\vec{z}} c_{\vec{k}-\vec{z}} = 0$

Beräta forts:



Kan skriva lösningarna som:

$$\begin{aligned} \text{Välj } \vec{k}. \quad \Psi_{\vec{k}} &= \sum_{\vec{z}} c_{\vec{k}-\vec{z}} e^{i(\vec{k}-\vec{z})\cdot\vec{r}} = \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \underbrace{\sum_{\vec{z}} c_{\vec{k}-\vec{z}} e^{-i\vec{z}\cdot\vec{r}}}_{\equiv U_{\vec{k}}(\vec{r})} = \end{aligned}$$

$$= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r}) ; U_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{z}) = U_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Också: $\Psi_{\vec{k}+\vec{z}} = \Psi_{\vec{k}}$ Från S.E. $\Rightarrow E(\vec{k}) = E(\vec{k}+\vec{z})$

\Rightarrow Energin periodisk \Rightarrow Räcker att lösa i 1:a BZ.

För givet \vec{k} vill vi lösa (A). Kan skrivas som matrisoperation:

$$\underline{0} = \begin{bmatrix} \dots & \frac{\hbar^2 (k - 2\pi/a)^2}{2m} - E & U_{100} & U_{200} & \dots \\ \dots & U_{-100} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E & U_{100} & \dots \\ \dots & U_{-200} & U_{-100} & \frac{\hbar^2 (k + 2\pi/a)^2}{2m} - E & \dots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \text{(alla } k, k, l) & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ c_{k-100} \\ c_{k,000} \\ c_{k,100} \\ \vdots \\ \text{(alla } k, k, l) \end{bmatrix}$$

A C

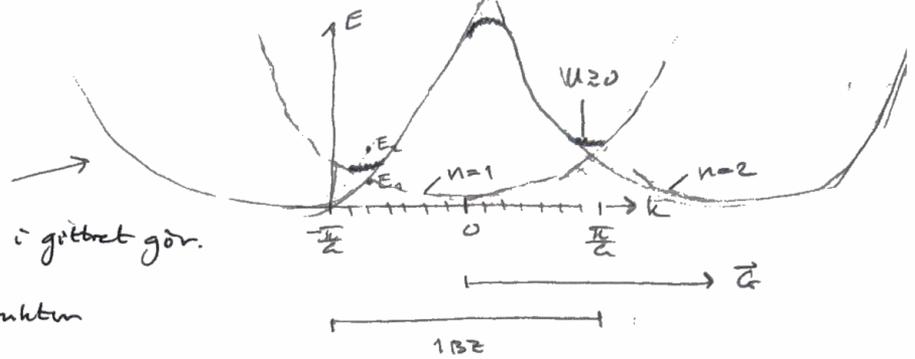
Icke-triviella lösningar för $\det \underline{A} = 0$

\uparrow
E

Lika många lösningar som element i diagonalen i \underline{A} : $E_n = E_1, E_2, \dots$

n kallas bandindex

Specialfall tomme-gitter-modellen



Vill lära oss om vad periodiciteten i gittret gör.

- Ger uppskattning om bandstrukturen
- Approximativt för enkla metaller (Alkali)

Se föreläsningsskriften
(föreläsning 2-3)

Antag potential $U(z) \approx 0$

Då är energin $E_{kin} \approx$ energin för fria elektroner $= \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2$

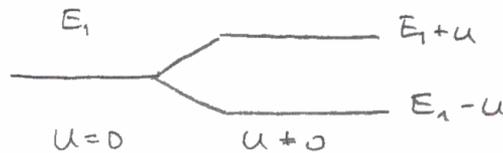
Scrag potential $U \geq 0$

Antag alla $U_z = 0$ förutom $U_{-100} = U = U_{100}$

$$\det \begin{bmatrix} E_{-1} - E & U \\ U & E_1 - E \end{bmatrix} = 0 = (E_1 - E)(E_{-1} - E) - U^2 = 0$$

$$\text{Antag } E_{-1} \approx E_1 \Rightarrow E_1^2 - 2E_1E + E^2 - U^2 = 0 \Rightarrow E = E_1 \pm \sqrt{E_1^2 + (U^2 - E_1^2)}$$

$$\Rightarrow E = E_1 \pm U$$



Se bnd i anteckningar
för påverkan på bandstrukturen
(tydligast för degenererad
energi)

\Rightarrow bandgap

Antal tillstånd i 1BZ per band:

1D: Längd $\frac{2\pi}{a}$, Antal k-punkter: $\frac{2\pi}{a} / \frac{2\pi}{L} = \frac{L}{a}$

3D: Volym i 1BZ: $\frac{(2\pi)^3}{V_{cell}}$
 V_{cell} ← volym av enhetscell i reella rummet

Vid bandgap: $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$

Vid bandgränser: $v_g = 0$

Antal k-punkter i 1BZ: $N_{1BZ} = \frac{(2\pi)^3}{V_{cell}} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{L^3}{V_{cell}}$ $N_{ant\ cell} = \frac{L^3}{V_{cell}} = N_{1BZ}$

dvs. 1 band för plats med $2N_{1BZ}$ e^- ?

Jämb antal (valens)elektroner \Rightarrow isolator/halvledare om alla i par
metall om några ej i par

Udda antal (valens)elektroner \Rightarrow metall

Blochelektroner \neq fria elektroner

Fria:

$$k = \frac{2\pi}{L} \cdot \text{heltal}$$

Spinn \uparrow eller \downarrow

$$k \in (-\infty, \infty)$$

$$\psi \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Bloch:

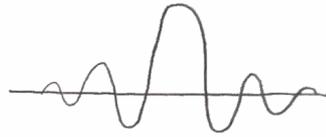
$$k = \frac{2\pi}{L} \cdot \text{heltal}$$

Spinn \uparrow eller \downarrow

$$k \in 1D: \text{ dvs } k \in [-\pi/a, \pi/a] \quad n=1,2,3,\dots,\infty$$

$$\psi \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_L(\vec{r})$$

Som fri partikel kan göra vågpaket



Rör sig med gruppshastighet

$$1D: v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$$

$$3D: v_g = \nabla_k \omega = \frac{1}{\hbar} \nabla E = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial k_x} \\ \frac{\partial E}{\partial k_y} \\ \frac{\partial E}{\partial k_z} \end{bmatrix}$$

$$\text{Accelerations: } 1D: \frac{dv_g}{dt} = \frac{\partial v_g}{\partial k} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \left(\hbar \frac{dk}{dt} \right)$$

a m^{-1} F



ÖRELÄSNING

12

24/2 - 20

Tight-binding-modellen

Linear combination of atomic orbitals (LCAO)

Tidigare: började med fri-elektron-beskrivning och konstruerade Bloch-vågfunktioner från dessa.

Nu: börjar från atomära vågfunktioner och skapar Bloch-vågfunktioner från dessa.

Förhållning av modellerna \Rightarrow identiska

Använd Born-Oppenheimer-approximationen.

Atomcentrerade vågfunktioner för isolerade atomer: $\phi_n(\vec{r})$

$$\hat{H}_{\text{atom}} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{atom}}(\vec{r})$$

$$\int \phi_n^*(\vec{r}) \hat{H}_{\text{atom}} \phi_n(\vec{r}) d\vec{r} = E_n$$

Om vi istället ser på e^- i ett gitter av atomer där grannerna artas ligger relativt långt borta (bortan växelverkan):

$$\hat{H}_{\text{solid}} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{atom}}(\vec{r})}_{\hat{H}_{\text{atom}}} + \underbrace{\sum_{\vec{R} \neq 0} V_{\text{atom}}(\vec{r} - \vec{R})}_{U(\vec{r})}$$

Summa alla andra atomer
 \vec{R} är gittervektor

Atomvågfunktionerna med \hat{H}_{solid} :

$$\int \phi_n^*(\vec{r}) \hat{H}_{\text{solid}} \phi_n(\vec{r}) d\vec{r} = E_n + \underbrace{\int \phi_n^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}) d\vec{r}}_{-\beta}$$

liten, oftast på energin pga närheten av andra atomer

Vill skapa riktiga vågfunktionerna $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ som superposition av atomvågfunktionerna.
Vill skapa Blochvågfunktion:

$$\psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} c_{\vec{k}, \vec{R}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) \quad (\text{antag normerad})$$

↑
vet ej dessa

Testa: $G_{\vec{k}, \vec{R}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$

Bloch?

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_n(\vec{r} + \vec{R} - \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \phi_n(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{R}'))$$

$$\vec{R} \rightarrow \vec{R} - \vec{R}' \Rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \square \text{ Bloch!}$$

$\Rightarrow \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R})$ är vägfunktioner för e^- , $\phi_n(\vec{r})$ atomvägfunktionser.

e^- 's energi:

$$E(\vec{k}) = \int \underbrace{\Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r})}_{\sum_{\vec{R}'}} \hat{H}_{\text{total}} \underbrace{\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})}_{\sum_{\vec{R}}} d\vec{r} = \sum_{\vec{R}', \vec{R}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_n^*(\vec{r} - \vec{R}') \hat{H}_{\text{total}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$$

$$= \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_n(\vec{r}) \hat{H}_{\text{total}} \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$$

För $\vec{R}=0$: = $E_n - \beta$ - Överlapp:

$$= \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_n(\vec{r}) (\hat{H}_{\text{atom}} + V(\vec{r})) \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r} =$$

$$= \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left(E_n \underbrace{\int \phi_n^* \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}}_{\text{Överlappsintegral} \approx 0} + \underbrace{\int \phi_n^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}}_{-\gamma(\vec{R})} \right)$$

$\Rightarrow E(\vec{k}) = E_n - \beta - \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \gamma(\vec{R})$ $\gamma(\vec{R}) = - \int \phi_n^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$

Ex:

1D s-orbital, dvs sfäriskt symmetrisk

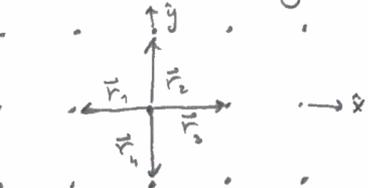


Tyng endast $\gamma(-a)$ och $\gamma(+a)$
Symmetri kring atomkärnan ger $\gamma(-a) = \gamma(+a) = \gamma_s$

$E(\vec{k}) = E_s - \beta_s - \gamma_s (e^{ik(-a)} + e^{ika}) = E_s - \beta_s - 2\gamma_s \cos(ka)$

Ex:

2D kvadratisk gitter



$$\vec{r}_1 = -a\hat{x}$$

$$\vec{r}_2 = a\hat{y}$$

$$\vec{r}_3 = a\hat{x}$$

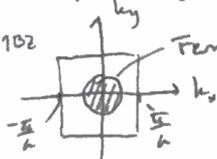
$$\vec{r}_4 = -a\hat{y}$$

Antag $\gamma(\vec{r}_1) = \gamma(\vec{r}_2) = \dots = \gamma$

$$E(\vec{k}) = E_{\text{isolerad}} - \beta - \gamma (e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{ik_x a} + e^{-ik_y a})$$

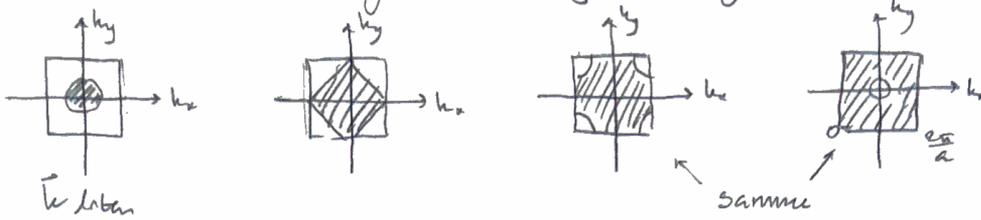
= $E_{\text{isolerad}} - \beta - 2\gamma (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$

Små \vec{k} : 102 $E(\vec{k}) \approx E_{\text{isolerad}} - \beta - 4\gamma + \gamma ((k_x a)^2 + (k_y a)^2)$



\sim ser ut som e^- i 2D med $m^* = \frac{\hbar^2}{2(\gamma a)^2}$

För större \vec{k} deformeras ytan som anger de fyllda bollarbenen (Fermiytor):



Föreläsning 11, forts.

Rörelsekvation (Newton II) för Blochelektroner: (baserad på ψ -elektron-vågfunktioner)

$$\frac{\text{energi}}{\text{tid}} = \text{kraft} \cdot \text{hastighet} \quad E = \hbar \omega$$

$$\begin{cases} \frac{dE}{dt} = F \cdot v_g \\ \frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt} = \hbar \frac{d\omega}{dk} \frac{dk}{dt} = \hbar v_g \frac{dk}{dt} \end{cases}$$

$$\Rightarrow F v_g = \hbar v_g \frac{dk}{dt} \Rightarrow \boxed{F = \hbar \frac{dk}{dt}} \quad \text{Rörelsekvation (extern kraft)}$$

Effektiva massor

$$\underline{1D}: \text{acceleration} = \frac{dv_g}{dt} = \frac{2v_g}{2k} \frac{dk}{dt} = \frac{2}{2k} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \right) \frac{1}{\hbar} F = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} F$$

$$\text{Newton II. } F = m_e a \Rightarrow \boxed{\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad \text{En sorts massa}$$

$$\underline{3D}: \boxed{\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i}}$$

Elektrisk respons i ett material

DC elektriskt fält

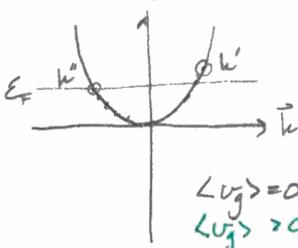
$$\text{För DC: } \vec{F} = -e\vec{E}$$

$$\text{För Blochvagnar: } \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}$$

$$\Rightarrow \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E}$$

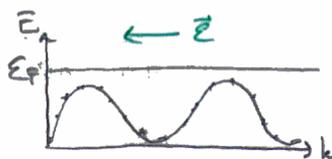
$$\leftarrow \vec{E}$$

- Metall:
(ej fullt band)



Med fält blir fördelningen asymmetrisk - v_g för k värden på höger sida är positiv ($v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$), negativ på vänster sida. Med \vec{E} blir på v_g positivt \Rightarrow Det flödar ström.
Spridning ser till att $k^- e^-$ förs till k^+ med relaxationsvid τ . Jämvikt E -fält \Rightarrow spridning

- Isolator:
(fullt band)



Fält är bra mycket här

AC elektriskt fält

Varför reflekterar metaller ljus? Varför är vissa material genomskinliga?

Ljus: $\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$ (Maxwell)

$v = \frac{c}{n}$, n brytningsindex

ϵ_{rel} = relativ dielektrisk konstant

$\Rightarrow n = \sqrt{\epsilon_{rel}}$

Drummodellen för AC-fält:

Instantant: $\vec{E} \downarrow$, $e^- \ominus$ ↑ \vec{x} , $p \oplus$ ↓. Förskjutning av e^- \Rightarrow Dipolmoment: $\vec{p} = -e\vec{x}$

Vibrerar av \ominus kring \oplus

Modell med fjäderkonstant c_f :

Dämpning med koefficient $\gamma = \frac{1}{\tau}$

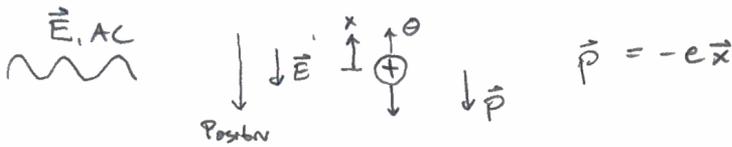
Rörelseekvation: $m \frac{d^2 x}{dt^2} = -c_f x(t) - m\gamma \frac{dx}{dt} - eE(t)$, $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$

Lösningen: $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$, $x_0 = \frac{eE_0}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma\omega}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{c_f}{m}}$

FÖRELÄSNING 13

26/2-20

forts. AC elektriskt fält



Modell med fjäderkonstant c_f :

Rörelseekvation: $m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -c_f x(t) - m\gamma \frac{dx}{dt} - eE(t)$, $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$

Lösningar: $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$, $x_0 = \frac{eE_0}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma\omega}$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{c_f}{m}}$

Polarsatser: $\vec{P} = n\vec{p} = -e n \vec{x} = -\frac{e^2 n E_0}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma\omega}$ (släpp "0" på E_0)
 täthet dipoler = e^- -täthet

$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$; $1 + \chi_e = \epsilon_r$; $\chi_e = \frac{\vec{P}}{\epsilon_0 \vec{E}}$

$\Rightarrow \epsilon_r = 1 + \chi_e = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E} = 1 + \frac{e^2 n E}{m E \epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$

obs! tecken

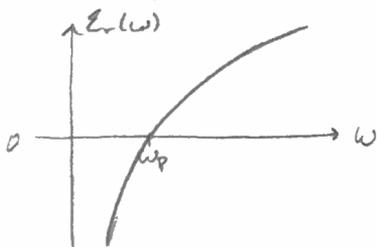
$\Rightarrow \epsilon_r = 1 + \frac{e^2 n}{m \epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$

• Specialfall metaller (enklaste approximationen):

Domineras av ledningselektroner, svagt bundna, dvs. $\omega_0 = 0$, svagt dämpande, dvs $\gamma \approx 0$

$\Rightarrow \epsilon_r = 1 - \frac{e^2 n}{m \epsilon_0} \frac{1}{\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$ $\omega_p^2 = \frac{e^2 n}{m \epsilon_0}$ Plasmafrequens

$\omega < \omega_p$: $\epsilon_r < 0$ ← Obs: Brytningsindex $n = \sqrt{\epsilon_r}$ imaginärt
 $\omega > \omega_p$: $\epsilon_r > 0$



ω_p brytpunkt i för UV-regionen

Hur ser \vec{E} -fältet ut i de två fallen?

(Lösningar till vågkvationen $\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \frac{\epsilon_r}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$; $\frac{1}{v^2} = \frac{n^2}{c^2} = \frac{\epsilon_r}{c^2}$)

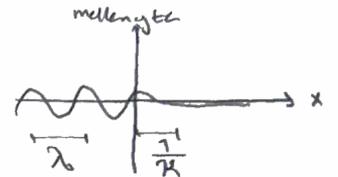
$\epsilon_r > 0$: "cos eller sin" propagerande-våg-lösningar

$E(x,t) = E_0 e^{i\frac{2\pi}{\lambda}x - i\omega t}$ (eller + om rör sig åt neg. håll) 

Fasfäshastighet: $v = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r}}$

$\epsilon_r < 0$: Dämpande-våg-lösningar (i positivt eller brett)

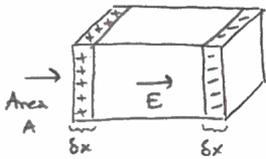
$E(x,t) = E_0 e^{-\kappa x - i\omega t}$; $\frac{1}{\kappa} = \frac{\lambda_0}{|\epsilon_r|}$



Intensitet minskar, energi bevarad => reflektion

•• $\omega < \omega_p$: reflektion , $\omega > \omega_p$: transmission

* Plasmafrequensen:



Kollektiva oscillationer av e^- -gasen - plasmavåg

Motstående plattkondensator:



$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0}$

Plasma $\sigma = en\delta x$

Rörelsekvation för ena "plattan":

massa $M = mnAsx$
laddning $Q = \sigma A (= en\delta x A)$

Rörelsekvation (Newton II):

$M \ddot{\delta x} = -QE \Rightarrow \ddot{\delta x} = - \frac{e^2 n^2 \delta x}{m \epsilon_0} \Rightarrow \delta x \sim e^{-i\omega_p t}$
 $= \omega_p^2$

Dvs. ω_p är frekvensen som plattan rör sig med.

I analogi med fononer kan denna rörelse kvantiseras till plasmoner

$\omega(k)$ där $\omega_p = \omega(k=0)$

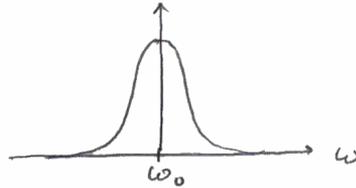
• Hur kommer bändstrukturen in?

Inget band i modellen här men påverkar ändå.

$$\epsilon_r = 1 + \frac{\Omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad ; \quad \Omega^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$$

Imaginärdelen:

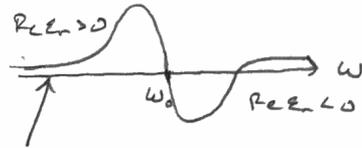
$$\text{Im}(\epsilon_r) = \frac{\gamma\omega\Omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$



Topp när egenfrekvensen ω₀, dvs. maximal absorption av ljuset in i egensvängningar!

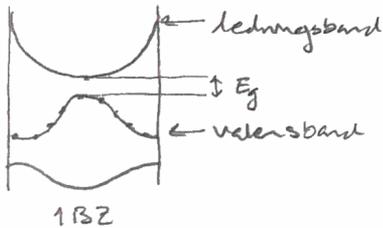
Realdelen:

$$\text{Re}(\epsilon_r) = 1 + \frac{\Omega^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$



nästan-konstant i ω, alltså som n för synligt ljus genom glas (ger "regnbågen")

Bändstruktur:



Vi får absorption vid energi E_g

$\omega \lesssim \omega_0 = \frac{E_g}{\hbar}$: Re εᵣ > 0, dvs. ljuset transmitteras (genomskinligt)

$\omega \gtrsim \omega_0$: Re εᵣ < 0, dvs. ljuset reflekteras, absorberas

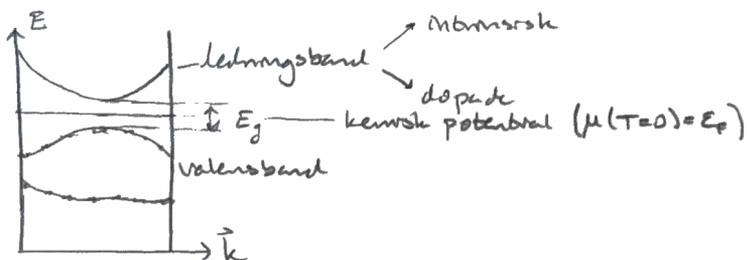
Halvledare

Isolator med "litet" bandgap E_g

Bör leda vid exv:

- Växelverkan med ljus (absorption/emission)
- Manipulation med spänning

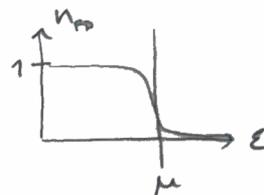
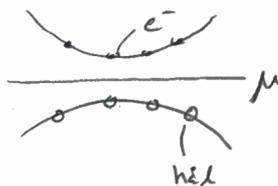
Grunderna



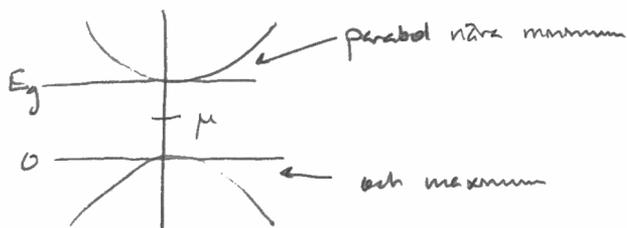
$T=0$: Valensband fullt med e^- , ledningsband tomt

$T>0$: Eventuellt några e^- existerar

μ alltid i gapet, annars metall:



Vid exitation:



Ledningsbandet:

inducerat band
 $E_{cond, T} = E_g + ak^2$

$$[a] = eV\hbar^2$$

Valensbandet:

$$E_{val, T} = 0 - bk^2$$

$$[b] = eV\hbar^2$$

$$a, b > 0$$

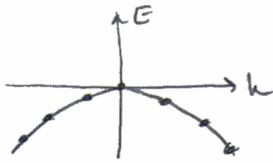
Effektive massan m^* för e^- :

Ledningsbandet (1D): $\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} E_{cond, T} = \frac{1}{\hbar^2} 2a > 0 \Rightarrow m_e^* > 0$

Valensbandet: $\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} E_{val, T} = \frac{1}{\hbar^2} (-2b) < 0 \Rightarrow m_e^* < 0$

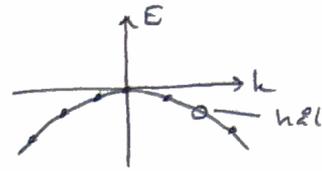
Obs! Negativ massa för $e^- \Rightarrow$ i termer av hål: avskatnad av e^- i annars fyllt band

Sterbt situationen valensbandet:



Total energi: E_0
 Total rörelse: $\bar{k}_{tot} = 0$
 Total ledning: 0 (inklusive joner)

Situationen efter belysningen e^- :



Total energi: $E_0 + bk^2$
 Total rörelse: $\bar{k}_{tot} = -\bar{h}$
 Total ledning: $+e$

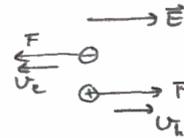
- \Rightarrow Hålet har:
- Positiv energi
 - Positiv ledning
 - Positiv effektiv massa: $\frac{1}{m_h^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2}{dk^2} (E_0 + bk^2) = \frac{2b}{\hbar^2} > 0$
- • Laddningsbärare beskrivs i termer av negativa e^- och positiva hål med effektiva massor:

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{2a} > 0, \quad m_h^* = \frac{\hbar^2}{2b} > 0$$

Konduktivitet / mobilitet

Enligt Drudemodellen:

e^- och hål: $\vec{E} = \rho \vec{k} t$:



Elektroner:

$$m_e^* \frac{dv_e}{dt} = -m_e^* \frac{v_e}{\tau_e} - eE \quad ; \quad \frac{dv_e}{dt} = 0 \Rightarrow v_e = -\frac{e\tau_e E}{m_e^*}$$

Bidrag till ström: $J_e = \underbrace{-en}_{\text{ledare per volym}} \cdot v_e = \frac{e^2 n \tau_e}{m_e^*} E = \sigma_e E \Rightarrow \sigma_e = \frac{e^2 n \tau_e}{m_e^*}$

Hål:

$$m_h^* \frac{dv_h}{dt} = -m_h^* \frac{v_h}{\tau_h} + eE \quad ; \quad \frac{dv_h}{dt} = 0 \Rightarrow v_h = \frac{e\tau_h E}{m_h^*}$$

Bidrag till ström: $J_h = \underbrace{ep}_{\text{hålantal}} v_h = \frac{e^2 p \tau_h}{m_h^*} E = \sigma_h E \Rightarrow \sigma_h = \frac{e^2 p \tau_h}{m_h^*}$

\Rightarrow Bidrar med samma tecken till strömmen!

Sämlad konduktivitet:

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_h = ne\mu_e + pe\mu_h \quad ; \quad \text{Mobilitet } \mu = \frac{e\tau}{m^*}$$

\rightarrow hur lättviktiga laddningarna är.

$$[\mu] = \frac{m/s}{V/m}$$

Driftfartighet per E-fält

F ÖRELÄSNING 14

2/3-20

Halleffekten

- Ett sätt att mäta täthet och tecken på ledningsbärare.
- Ofta gäller $n \gg p$ eller $p \gg n$ för att man **dopar** halvledaren.

Antag en typ av ledningsbärare:

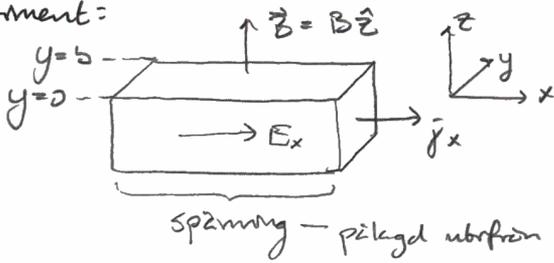
Elektroner $q = -e$, eller

Hål $q = e$

Täthet $n_{\pm} = \begin{cases} n \\ p \end{cases}$

Strömtäthet: $\vec{j}_{\pm} = q n_{\pm} \vec{v}_{\pm}$

Experiment:



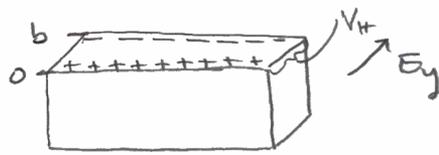
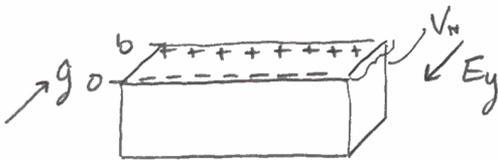
Hastigheter: elektroner: $v_x < 0$
 hål: $v_x > 0$

Lorentzkraft: $\vec{F} = q \vec{v} \times \vec{B} = -q v_x B \hat{y} =$
 $= \begin{cases} e v_x B \hat{y} & \text{elek} \\ -e v_x B \hat{y} & \text{hål} \end{cases}$

Dvs. $\vec{F} \parallel -\hat{y}$ för både.

\Rightarrow Bygger upp laddning q vid kanten $y=0$

\Rightarrow Spänning i y -led



V_H : Hallspänning

Tecken på Hallspänningen: $V_H \propto -E_y b$

Ger tecken på ledningsbärare: $V_H > 0 \Leftrightarrow$ elektroner

$V_H < 0 \Leftrightarrow$ hål

Kvarströmmar: laddningar rör sig bara i x -led (bara ström: x -led, ingen i y)
 Kretsens kraftbalans i y -led.

⇒ Lorentzkraft + kraft från $E_y = 0$:

$$-q v_x B + q E_y = 0 \quad ; \quad v_x = \frac{j_x}{n q} \Rightarrow$$

$$E_y = \frac{j_x B_z}{n q}$$

Hallkoefficient:

$$R_H \equiv \frac{E_y}{j_x B_z} = \frac{1}{n q}$$

Elektroner: $R_H = -\frac{1}{n e} < 0$

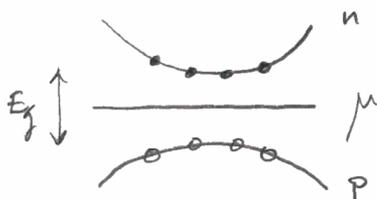
Hål: $R_H = \frac{1}{p e} > 0$

Med både elektroner och hål:

$$R_H = \frac{1}{e} \frac{p - n (\mu_e / \mu_h)^2}{(p + n (\mu_e / \mu_h)^2)}$$

Intrinsisk halvledare

Kristall (nästan) utan orenheter



e^- i ledningsband och hål skapas termiskt!

$$n = p$$

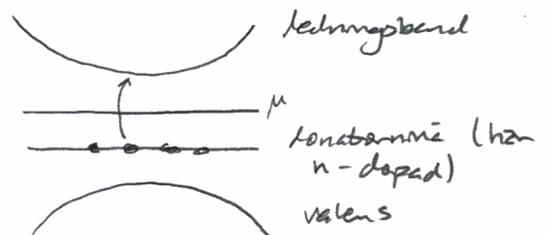
Svårt att skapa i praktiken, alltid vissa orenheter.

Extrinsisk (dopad) halvledare

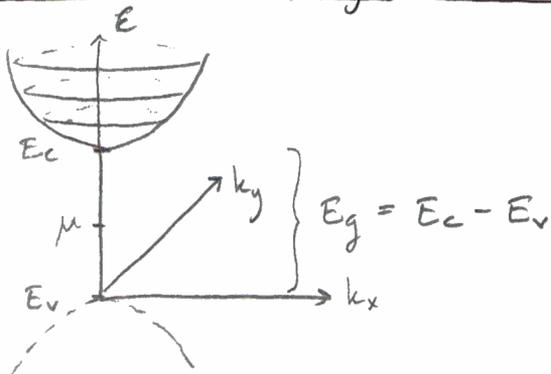
"Orenheter" i form av atomer m.

Extra valens e^- (donatorer) eller färre (acceptorer)

→ extra e^- eller hål, som kan existera från donatornivån, till lednings- eller valensband.



Elektron-täthet i ledningsbandet (n) och håltäthet i valensbandet (p)



$$E_c - \mu \gg k_B T \Rightarrow E - \mu \gg k_B T$$

Antag att μ ligger "långt" från E_c och E_v :

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

Elektron-tätheten ges av Fermi-Dirac, vid E

$$n_{FD}(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \approx e^{-(E-\mu)/k_B T} \quad (E \geq E_c) \quad \text{(Boltzmann)}$$

Helt oberoende av eventuellt dopning!

Totalt antal e^- i ledningsbandet per volym V :

$$n = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} D(E) n_{FD}(E) dE$$

Nära n_{FD} , då: $E - E_c \sim k^2$ (parabel), som föra e^- , med effektiv massa m_e^* .

$$D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} \quad \text{Stunt } m_e^* \rightarrow \text{stunt } D$$

$$\Rightarrow n = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} e^{-(E - E_c)/k_B T} e^{-(E_c - \mu)/k_B T} dE$$

$$x = \frac{E - E_c}{k_B T} \quad ; \quad \frac{dx}{dE} = \frac{1}{k_B T}, \quad E = E_c \rightarrow x = 0$$

$$\Rightarrow n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$

Här har vi $n(T, \mu)$,
tätheten av e^- i ledningsbandet.

$\sim T^{3/2}$ Libera intet
väldigt stor

Med realistiska värden blir $n \approx 10^{10} - 10^{15} / \text{cm}^3$ (jmf. metall: $\sim 10^{23} / \text{cm}^3$)

För h^* :

Använd $1 - n_{FD}(E)$ och $p = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{E_v} D(E) (1 - n_{FD}(E)) dE$, $\sqrt{E_v - E}$ i $D(E)$

$$\Rightarrow p = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m_h^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

Skilnaden på n och p är dels m_e^* / m_h^* , dels $\sim e^{+ \mu / k_B T} / \sim e^{- \mu / k_B T}$.
Både beror på μ , men produkten $n \cdot p$ är oberoende av μ :

$$n \cdot p = \frac{1}{2} \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} e^{-\frac{(E_c - E_v)}{E_g} / k_B T}$$

Massverkens lag: - Inget μ -beroende.
- Beror på bandgapet E_g .
- Inget antagande om intrinsisk eller dopad halvledare.

För intrinsiska (obopade) halvledare har vi ytterligare:

$$n = p = \sqrt{n \cdot p} = \frac{1}{2} \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g / 2k_B T}$$

n och p oberoende av μ !

Intrinsiska halvledare:

Hittar uttryck för μ :

$n = p$ (tag uttrycken för n och p och sätt $n = p$)

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{k_B T m_e^*}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(E_c - \mu)/k_B T} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{k_B T m_h^*}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

$$\Rightarrow e^{-(-E_c - E_v + 2\mu)/k_B T} = \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)^{3/2}$$

$$E_c + E_v = E_v + E_g + E_v = E_g + 2E_v$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu = E_v + \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)}$$
 För intrinsiska halvledare

stark högerkänning, lågt m_e^* → $\mu > \frac{E_g}{2} + E_v$

liten, då $E_g/2$ dominerar. $k_B T \ln(\dots)$ blir en korrektion

$m_h^* > m_e^*$: $\mu > \frac{E_g}{2} + E_v$

liten högerkänning, stort m_e^* → $\ln \frac{m_h^*}{m_e^*} > 0$

$m_h^* < m_e^*$: $\mu < \frac{E_g}{2} + E_v$

$\ln \frac{m_h^*}{m_e^*} < 0$

n och p känsliga för T :

Odopad Si: $E_g = 1,11 \text{ eV}$

$n(150 \text{ K}) = 4 \cdot 10^6 / \text{m}^3$

$n(300 \text{ K}) = 1,5 \cdot 10^{16} / \text{m}^3$

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

kontf. låter jmf. med metall: $\sim 10^{28} / \text{m}^3$

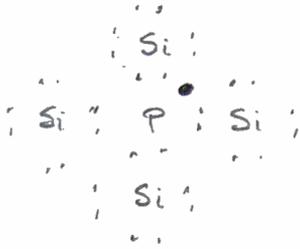
\Rightarrow beror inte n och p på T

$$\ln \sigma \sim T$$

Detta är en skillnad från metall som har i stort sett oförändrad konduktivitets vid olika temperaturer!

Dopade halvledare

Antag låg koncentration av dopngatener \rightarrow isolerade från varandra.



$a = \text{avtre } e^-$

Vad är joniseringsenergin? (Energin att dra \bullet från P till ledningsbandet)

e^- nägranstans bort från P men fortfarande i materialet (dielektrikum)

Kan ses som jonisering av H men i dielektriskt material och m_e^* .

Väte, bindningsenergi i grundtillstånd: $E_0 = -\frac{m_e e^4}{32 \pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = -1 R_y = -13,6 \text{ eV}$

Coulomb i dielektrikum med $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$: $F = -\frac{1}{\epsilon} \frac{q_1 q_2}{r^2}$

drs. $\frac{e^2}{\epsilon_0} \rightarrow \frac{e^2}{\epsilon} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{\epsilon_r}$

Joniseringsenergi för dopanten: $E_0^{\text{dop}} = E_0^{\text{väte}} \frac{m_e^*}{m_e} \frac{1}{\epsilon_r^2}$

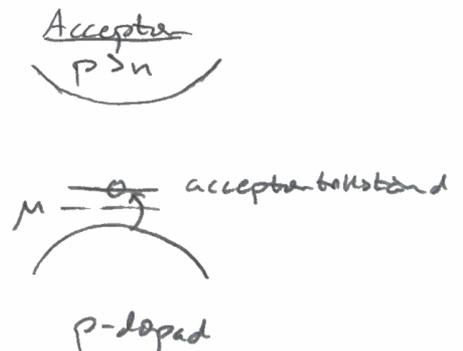
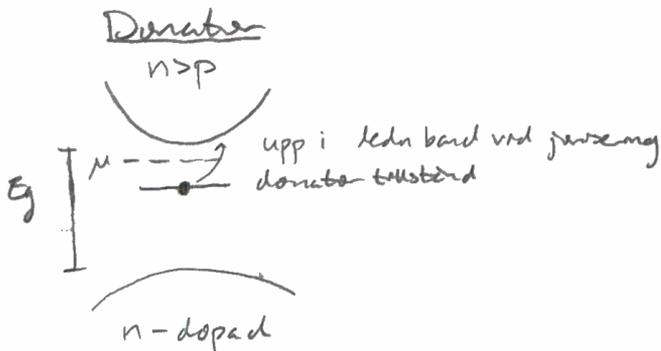
$\epsilon_r = 10, m_e^* = 0,1 m_e$

$\Rightarrow E_0^{\text{dop}} = -13,6 \text{ eV} \cdot \frac{0,1}{10^2} = -13,6 \text{ meV}$

Motvarer: $T = E_{\text{dop}} / k_B \approx 100 \text{ K}$

drs. e^- sitter löst (i motsats till H:s e^-), donatoratomerna joniserar lätt termiskt.

\Rightarrow Donator- e^- starkt bidrag till n (eller p för hål).



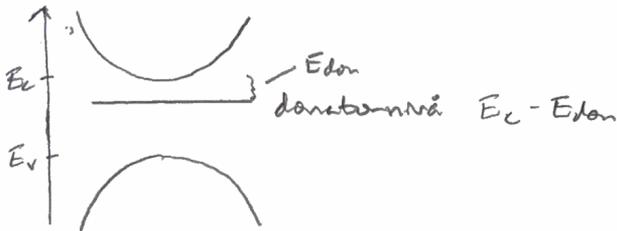
FÖRELÄSNING 15

5/3-20

Hur beräknas n och p för dopade halvledare?

Hur $n(\mu, T)$, $p(\mu, T)$ beror av dopning

$n \neq p$:



n_d : tillståndstäthet i donatornivå

Sannolikhet att donatornivå har e^- :

$$P_d = \frac{1}{e^{(E_c - E_d - \mu)/k_B T} + 1}$$

Centralföriserade donatorer: $n_d^+ = n_d(1 - P_d) = \frac{n_d}{e^{-(E_c - E_d - \mu)/k_B T} + 1}$

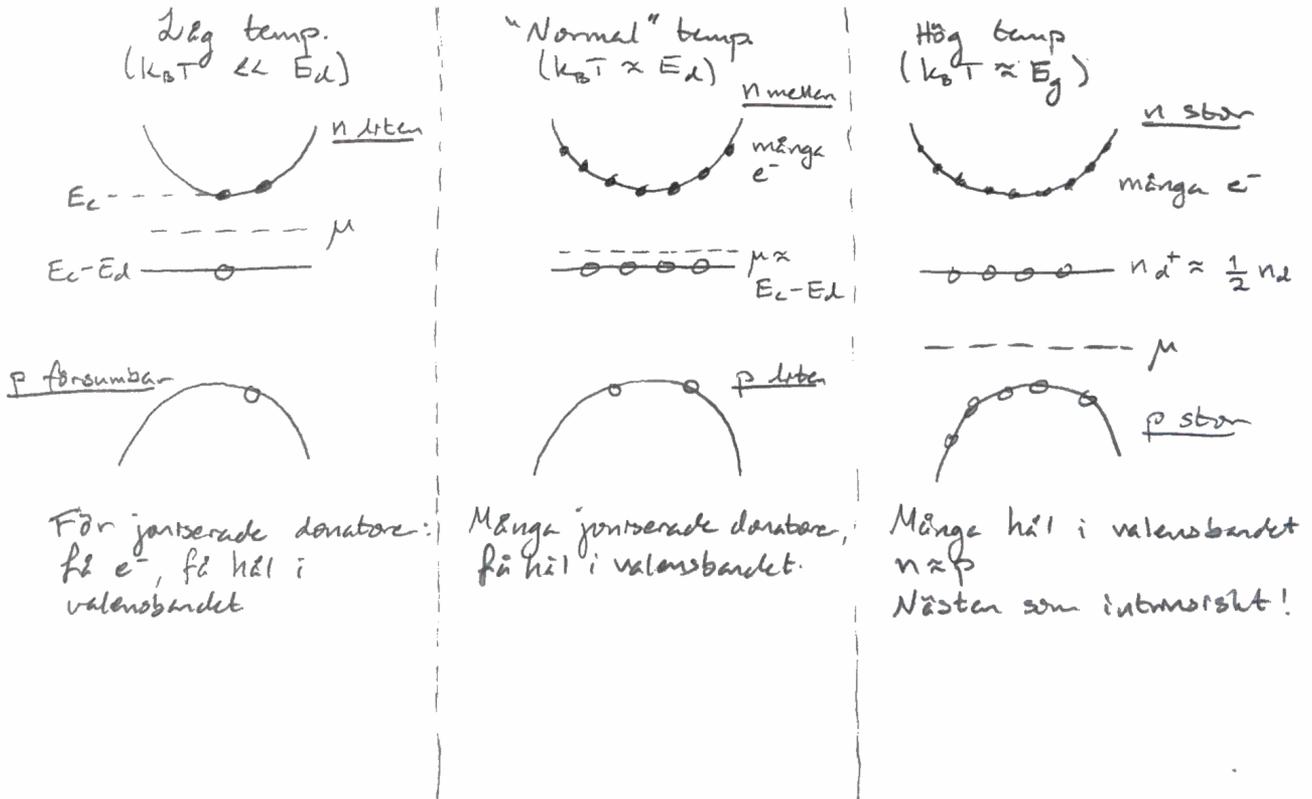
Laddningskonservering: $n_d^+ + p = n$

↑
elektroner i ledningsbandet n kommer antingen från hål i valensbandet p eller föriserade donatorer n_d^+

$$\Rightarrow n - p = \frac{n_d}{e^{-(E_c - E_d - \mu)/k_B T} + 1}$$

+ Utbyck för n och $p \Rightarrow$
3 ekv, 3 okända, n, p, μ

Gränser (n-doped):



Sättas ihop n- och p-dopade material \rightarrow pn-junction (diode)

Har endast sett på direkt bandgap, där e^- kan samma \bar{k} innan och efter övergång mellan banden.

Magnetism

Dia- och paramagnetism

Magnetism är ett kvantfysikaliskt fenomen. Skall arbeta genom längdskalorna elektroner \rightarrow atomer \rightarrow material.

Magnetiska \vec{H} -fältet: $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M}$ \vec{M} : magnetiseringsfält (materiets reaktion på \vec{B})

Ej permanentmagneter: $\vec{M} = \chi_m \vec{H}$ χ_m magnetisk susceptibilitet

Generellt: $\chi_m = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial H^2}$
 $\chi_{\mu\nu} = \frac{\partial M_\mu}{\partial H_\nu} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial H_\mu \partial H_\nu}$ om ej isotrop

Diamagnetism: $\chi_m < 0$, $\sim 10^{-5}$ endast i magnetfält, med \vec{H}

Paramagnetism: $\chi_m > 0$, $\sim 10^{-5}$ — " —

Ferromagnetism: $\chi_m > 0$, $\sim 10^3$ permanentmagnet

Börjar med magnetism i påtryckt magnetfält

Ändring i elektroner

Lägg på magnetfält Ändring i potentiella energi i Jermans kinetiska energi kan variera från eller ses som perturbation (NMR): $A_{kin} \rightarrow A_{kin} + A_{int}$

$\vec{H}_{kin} = \frac{\vec{p}^2}{2m_e}$; $\mu_0 \vec{H} = \nabla \times \vec{A}$, t.e.s $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{r} \times \mu_0 \vec{H}$
 $\rightarrow \vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$ (i.e. i magnetfält)

Välj $\vec{H} \parallel \vec{z}$, dvs $\vec{H} = (0, 0, H)$

$\hat{H}_{kin} \cdot \hat{H}_{kin} = \frac{1}{2m_e} (\vec{p} + e\vec{A})^2 = \left\{ \vec{p} \text{ och } \vec{A} \text{ kommutera} \right\} =$
 $= \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + \frac{e\mu_0 \hbar}{2m_e} \vec{L} \cdot \vec{H} + \frac{e^2 \mu_0^2}{8m_e} (x^2 + y^2) H^2$

$\rightarrow A_{int} = \underbrace{\mu_0 \mu_B}_{\text{permanent}} \vec{L} \cdot \vec{H} + \underbrace{\frac{e^2 \mu_0^2}{8m_e}}_{\text{operator}} (x^2 + y^2) H^2$; $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

Med spinbidrag: $\vec{L} \rightarrow \vec{L} + g_0 \vec{S}$; $g_0 = 2$
spinbidrag

$$\Rightarrow \hat{H}'_{\text{kin}} = \mu_0 \mu_B (\vec{L} + g_0 \vec{S}) \cdot \vec{H} + \frac{e^2 \mu_0^2}{8m_e} (x^2 + y^2) H^2$$

Perturbationsräkning: Till ordning \vec{H}^2

$$\Delta E_n = \langle n | \hat{H}'_{\text{kin}}(H) | n \rangle + \sum_{n' \neq 0} \frac{|\langle n | \hat{H}'_{\text{kin}}(H) | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$$

Grundtillståndet:

$$\Delta E_0 = \mu_B \mu_0 \vec{H} \cdot \langle 0 | \vec{L} + g_0 \vec{S} | 0 \rangle \quad (1)$$

$$+ \mu_0^2 \mu_B^2 \sum_{n' \neq 0} \frac{|\langle 0 | \vec{H} \cdot (\vec{L} + g_0 \vec{S}) | n' \rangle|^2}{E_0 - E_{n'}} \quad (2)$$

$$+ \frac{e^2 \mu_0^2}{8m_e} H^2 \langle 0 | x^2 + y^2 | 0 \rangle \quad (3)$$

(3) Larmor / Langerm diamagnetism. Term ≥ 0

(1) Paramagnetism. $\hbar L_z = (\vec{r} \times \vec{p})_z$: projektion på magnetfältets riktning. Energi negativ om L_z negativ. Magnetiskt moment:
 $\vec{m} = \frac{q}{2m_e} \vec{L} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$. För e^- pekar \vec{m} i \vec{H} 's riktning, dvs. $m_z > 0$, dvs. $L_z < 0$, dvs. energibidrag negativt.

(2) van Vleck paramagnetism. Term < 0 då $E_0 - E_{n'}$, $n' \neq 0$, negativt.

Nivå: atomer

Diamagnetism: Den diamagnetiska termen gäller alla e^- , är alltid positiv och tar inte ut e^- för e^- . Bidrag ungefär en summa.

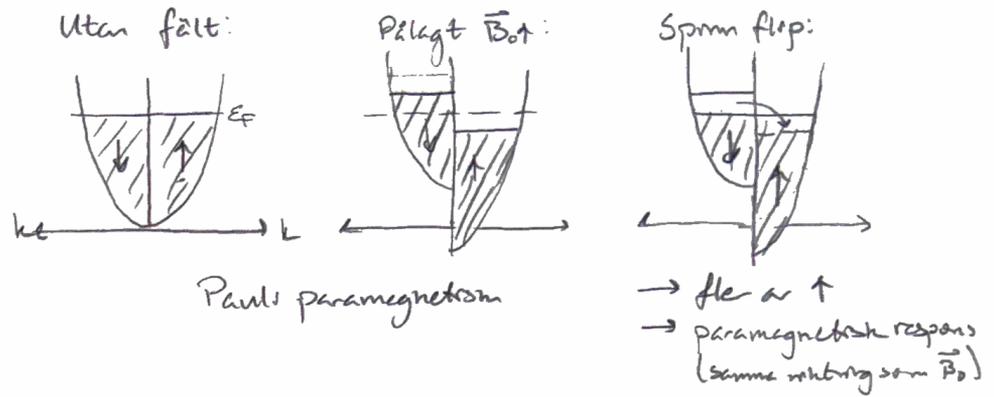
Paramagnetism: e^- 's bidrag kan kancellera: fyllda orbitaler. Endast icke-fyllda orbitalers e^- kan ge bidrag. Bidrag mycket mindre än en summa av e^- 's paraterm. Om $\sum \vec{j} = \sum \vec{L} + g_0 \sum \vec{S} = 0$, ingen paramagnetism. (1) = (2) = 0

Nivå: material

Diamagnetism: För alla e^- , bortsett från fria e^- i metaller, är det fortfarande summa av varje e^- 's diamagnetiska bidrag. e^- bundna i some atomer och påverkas inte av ändrad temp. Langerm diamagnetism.

För e^- i metall är bidraget ungefär som för e^- i nivå, med $(m_e/m_e^*)^2$ (och endast e^- nära Fermi påverkas). Samma storleksordning som från atomer. Landau diamagnetism.

Paramagnetism: Från e^- i metall:



Bidrag från atomerna från deras bundna e^- : Curie paramagnetism.
Endast icke-fyllde orbitaler bidrar men i material går många av dessa åt till bindningar så ^{endast} material med icke-fyllde orbitaler kvar efter bindning är relevanta. Djupa orbitaler, som $4f$, ingår ej i bindning och kan bidra. Temp. beroende fördelning av magnetiska moment.
 $\chi_m \propto 1/T \sim 10^{-5} - 10^{-2}$ vid rumtemp., dvs. dominerar diamagnetism om den finns.

Material: **Dia:** Från alla e^- , dvs. finns alltid, $\chi_m \sim 10^{-5}$, oberoende av temp.
Bidrag av samma storlek från fria e^- i metall.

Para: Från e^- i metall $\chi_m \sim 10^{-5}$
Atommagnetiskt moment $\chi_m \sim 10^{-3} - 10^{-2}$, temp. beroende (Curie)

∴ Alla material har diamagnetism, som är liten

Metaller har även paramagnetism, som är liten.

Vissa material har Curie paramagnetism, som i så fall dominerar diamagnetism.

Vissa material har ferromagnetism som i så fall dominerar dessa.

F ÖRELÄSNING 16

4/3-20

Permanenta magneter

Ferro-, ferri-, antiferromagnetism.

e^- 's spin + kombination med Coulombväxelverkan.

Ferromagnetism: Parallella magnetiska moment på e^- (2tmn-stone i domäner)

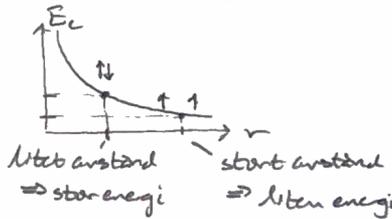
Obs: Men inte direkt växelverkan, m.a.o. inte magnetisk dipol-dipol växelverkan (alltså för svag)

Istället är orsaken utbytesväxelverkan (exchange interaction) = Pauliprincipen + Coulombväxelverkan.

Överlappande vågfunktioner (asymmetrisk för fermioner) medför att två e^- med samma spin positionerar sig så långt från varandra det går

Spin: $\uparrow + \downarrow \Rightarrow \uparrow\downarrow$ Pauli: Två e^- med samma spin kan ej överlappe.
 $\uparrow + \uparrow \not\Rightarrow \uparrow\uparrow$

Men Coulomb: $E_c = \frac{e^2}{\epsilon_0 r}$



M.a.o. parallella spin placeras på stort avstånd, vilket ger ett litet bidrag från Coulombväxelverkan, alltså är en sådan situation att fördra energi-mässigt

Ferromagnetism uppstår alltså från elektrostatik, inte magnetostatik.

Ferromagnetism har helt annat ursprung än dia- och paramagnetism - elektrostatiska krafter mycket starkare än magnetiska krafter.

Järn, kobolt, nickel, gadolinium, dysprosium + föreningar \rightarrow ferromagnetism

Modell för ferromagnetism

Heisenbergs modell för utbytesväxelverkan. $\hat{H} = -J \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j$
Hamilton utbytesväxelverkan spinoperatör

Approximativt ofta bara närmsta grannene.

- $J > 0$: parallella spin fördras (ferromagnetism)
- $J < 0$: antiparallella spin fördras (antiferromagnetism)

Introducera modellen på gitter med pålagt magnetfält \vec{B} :

$$\hat{H} = - \sum_{i \neq j} \sum_j X_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + g_0 \mu_B \mu_0 \vec{H} \cdot \sum_i \hat{S}_i$$

↑
magnetfält

Förenkla: $X_{ij} = 0$, inte närmsta grannar
 $X_{ij} = X$, konstant om närmsta grannar

$$\hat{H} = - X \sum_i \sum_{n.g.} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{n.g.} + g_0 \mu_B \mu_0 \vec{H} \cdot \sum_i \hat{S}_i$$

Parallelle spin ger grundtillstånd

Approximera ytterloggare:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{S}_i \cdot \left(-X \sum_{n.g.} \hat{S}_{n.g.} + g_0 \mu_B \mu_0 \vec{H} \right) = \sum_i \hat{S}_i \cdot \left(-n_{n.g.} X \langle \hat{S} \rangle + g_0 \mu_B \mu_0 \vec{H} \right)$$

↑
antal n.g.

magnetiska dipolmoment per volym: $\vec{M} = -g_0 \mu_B \langle \hat{S} \rangle N$

$$\hat{H} = \sum_i \hat{S}_i \cdot \left(\frac{n_{n.g.} X V}{g_0 \mu_B N} \vec{M} + g_0 \mu_B \mu_0 \vec{H} \right) = g_0 \mu_B \sum_i \hat{S}_i \cdot (\vec{B}_w + \mu_0 \vec{H})$$

Weissfält: $\vec{B}_w = \frac{\vec{M} n_{n.g.} X V}{g_0^2 \mu_B^2 N}$

$\hat{H} = g_0 \mu_B \sum_i \hat{S}_i \cdot (\vec{B}_w + \mu_0 \vec{H})$ tolkas som
 lokala spin som påverkas av $\vec{B}_w + \mu_0 \vec{H}$

Om inget (vibrat) magnetfält, har vi kvar magnetiseringen?

Tag $\vec{H} = 0$, för spin $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$:

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta E}{k_B T}\right) \Rightarrow$$

$$M(T) = \underbrace{\mu_B N}_{M(T=0)} \tanh\left(\frac{\overbrace{g_0 \mu_B n_{n.g.} \mu_0 B_w}^{\propto 1}}{k_B T}\right)$$

Reducerade variabler: $m = \frac{M(T)}{M(T=0)} = \frac{M(T) V}{\mu_B N}$; $t = \frac{k_B T g_0^2}{X n_{n.g.}} = \frac{T}{T_c}$; $\theta_c = \frac{n_{n.g.} X}{g_0^2 k_B}$

↑
Curie-temp

$$\Rightarrow m = \tanh\left(\frac{m}{t}\right) = \tanh\left(m \frac{\theta_c}{T}\right)$$

Bra modell om magnetiska moment lokaliserade på gitterpositioner.

Domänen

Ursprung: spontan magnetisering blir lokalt olika.



↑↑↑ → → ↓↓↓ Relaterad till spinväggar

Grundtillstånd ↑↑↑↑ minsta exciterade spin-flip
 ↑↑↓↑ → stort energibredvid

Mindre energibredvid om spinnar ändras lite från plats till plats: ↑↑↑ → → ↓↓↓

Vilkar på egenfrekvens: $E = \hbar\omega = 4 \times 5 (1 - \cos(ka))$ 1D

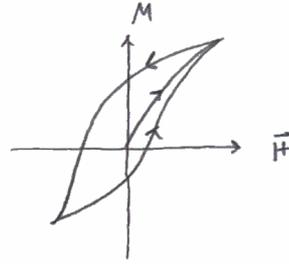
Små $k \rightarrow$ längd $\lambda \rightarrow$ lågt E

Kvantiserade magnoner (som fononer) \rightarrow harmonisk oscillator för små k .

$$E_k = (n_k + \frac{1}{2}) \hbar\omega_k$$

Magnon: 1 hel spinflipp $\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$.

Flytt av domänväggar ger hysteresis.

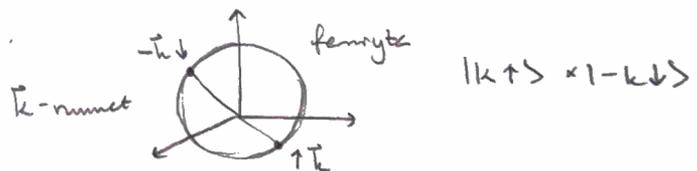
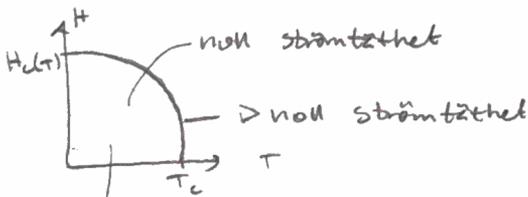


Supraledning

- Perfekt ledare, resistivitet $\rho = 0$ (DC).
- Vanlig ledare \neq supraledare.
- Ferromagnet ej supraledare.
- Ej gräns: sig men elektronstruktur och vibrationer. $\omega = \left(\frac{\rho}{M}\right)^{1/2}$
- Isotopeffekt: beror på isomässan.
- Meissner-effekt: perfekt diamagnetism, $\chi_m = -1$
- Exempel på makroskopisk kvanttillstånd: supraledning, laserljus, superfluiditet. För dessa gäller att partiklar är bosoner.

Supraledning: 2 e^- går ihop till boson, "Cooper par".

Cooperparen bildas över fermiytan.



Nanmettillstånd: $H_c(T) = H_c(T=0) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)$

Dvs. temperatur, magnetfält, ström kan få supraledningen att brytas av (fasövergång supraledning \rightarrow normal).

Meissnereffekt:

$$\chi_m = -1 \quad \text{dvs.} \quad \vec{M} = -\vec{H} \quad \text{total kancellering av fält i metallen}$$

Normal ledare: inducerad diamagnetism mikroskopiskt magnetiskt moment.

Supraleदार: makroskopisk superströmmar tätt på ytan \rightarrow helt "ny" effekt

Isotopeffekten:

$$T_c \propto M^{-1/2}$$

Born-Oppenheimer-approximation: jonerne långsammare

Här: kan ej ignoreras.

$$\omega = \sqrt{\frac{\chi}{M}} \quad \text{för vibrationer, samma sätt som isotopeffekten} \rightarrow \text{vibrationer av joner spelar roll!}$$

Teoretisk beskrivning

Makroskopiskt kvanttillstånd: $\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{n_s} e^{i\theta(\vec{r}, t)}$; $n_s = \Psi^* \Psi =$ täthet av superledande e^- , konst. i \vec{r}, t .

Generellt om strömmar:

$$\text{Sannolikhetsströmtäthet: } \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi)^* \Psi]$$

$$\text{Elektrisk strömtäthet, superledning: } \vec{j}_s = q \cdot \vec{j}, \quad q = -2e$$

$$\begin{aligned} \text{Med magnetfält: } \vec{j}_s &= -\frac{i\hbar q}{2m} [\Psi^* \nabla \Psi + \Psi^* \left(\frac{q\vec{A}\Psi}{i\hbar}\right) - (\nabla \Psi)^* \Psi - \left(\frac{q\vec{A}\Psi}{i\hbar}\right)^* \Psi] = \\ &= \dots = \frac{q n_s}{2m} (\hbar \nabla \theta + 2e\vec{A}) \end{aligned}$$

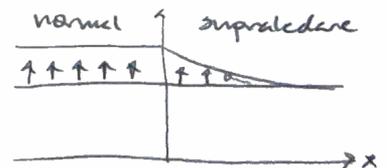
$$\mu_0 \nabla \times \vec{j}_s = \frac{q n_s}{2m} 2e \nabla \times \vec{A} = -\frac{4e^2 n_s \mu_0}{m} \vec{B}$$

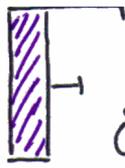
$$\text{London ekvation: } \mu_0 \nabla \times \vec{j}_s = -\frac{4e^2 n_s}{m} \vec{B} \mu_0; \quad \vec{j}_s = \frac{q n_s}{2m} (\hbar \nabla \theta + 2e\vec{A}); \quad q = -2e$$

Kombinera med Ampères lag (Maxwell): $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}_s$

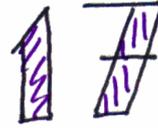
$$\Rightarrow \boxed{\nabla^2 \vec{B} = -\frac{\vec{B}}{\lambda_L^2}} \quad \frac{1}{\lambda_L^2} = \frac{4e^2 n_s \mu_0}{m} \quad \lambda_L: \text{Londonpenetrationsdjup} \sim 50-500 \text{ nm}$$

Lösning: Exponentiellt avtagande $B = B_{\text{Banplan}} e^{-x/\lambda_L}$





ÖRELÄSNING

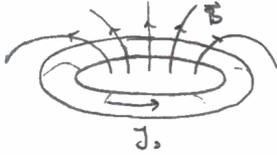


9/3-20

fets.

Fluxkvantisering

Supraleedande ring, inget magnetfält inne i ringen (bortom λ_L)



$$\mu \vec{J}_s = \nabla \times \vec{B} = 0$$

$\Phi = \vec{B} \cdot \text{Area}$
Kvantiserad: $\Phi_0 = h/2e$
magnetiskt flux kvantum
 $\Phi_0^{-1} = \text{Josephsonkonstant}$

Ett makroskopiskt tillstånd, många bosoner, kan behandla tillståndet klassiskt \rightarrow även i ringen. Stående vågor i ringen, dvs. kvantiserade.

Fas skillnaden efter ett varv måste vara 2π -heltal.

Meissner-effekt \rightarrow inget magnetfält inuti materialet, kompenseras med yttströmmar J_s (screening current).

Längd inne i materialet:

$$\vec{J}_s = 0 = -\frac{2en_s}{m} (\hbar \nabla \theta + 2e\vec{A}), \text{ dvs. } \hbar \nabla \theta = -2e\vec{A}$$

$$\oint_c \nabla \theta \cdot d\vec{l} = \theta(\text{slut}) - \theta(\text{start}) = 2\pi \cdot \text{heltal}$$

$$\begin{aligned} \oint_c \nabla \theta \cdot d\vec{l} &= -\frac{2e}{\hbar} \oint_c \vec{A} \cdot d\vec{l} = \{\text{Stokes}\} = -\frac{2e}{\hbar} \int_{\text{areal med c som rand}} (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{s} = -\frac{2e}{\hbar} \int \vec{B} \cdot d\vec{s} = \\ &= -\frac{2e}{\hbar} \Phi \end{aligned}$$

$\therefore \Phi = \frac{h}{2e} \cdot \text{heltal}$ $\frac{h}{2e}$: fluxkvant $\sim 2 \cdot 10^{-15} \text{ Tm}^2$

Konsekvenser:

- "Persistent currents" på ytan: kan bara minska i kvanta \rightarrow bevarad ström.
- "Superconducting quantum interference device" (SQUID) för mätningar av flux.



Supraleedande ring med litet område ' normalt ' material \rightarrow tunnle genom

Utän externt \vec{B} : $I_a = I_b = \frac{1}{2} I$

Litet \vec{B} : $I_a = \frac{1}{2} I - I_s$; $I_b = \frac{1}{2} I + I_s > I_c \Rightarrow$ spänning över Josephson junction

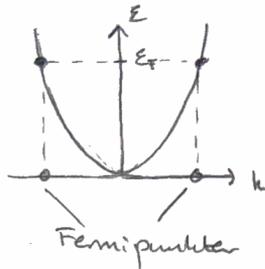
Större \vec{B} : Tillslut $\Phi > \Phi_0/2$, då energimässigt bättre att ändra riktning på I_s för ett skuffa Φ_0 i ringen.

Fermiytor

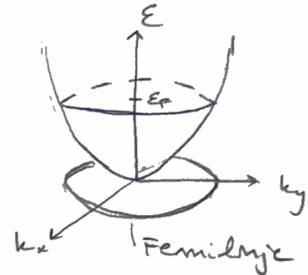
Yta med konstant energi i k-rummet, som delar k-rummet i fyllda och tomma band vid $T=0$.

Ex:

1D: Fri e^-



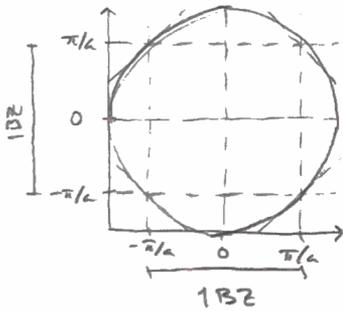
2D: Fri e^-



3D: Fri e^- Fermisfär som ritas i k-rummet (k_x, k_y, k_z) är faktiskt yta, E en fjärde dim $|k| = k_F$

Fria e^- -ytan är sfärisk: $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \Rightarrow k_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e E_F}$

Fermiytor är viktiga för metaller då elektriska egenskaper bestäms av ändringen i antal tillstånd nära E_F .



Andra skala:



1BZ



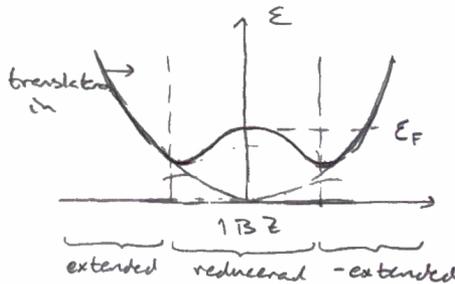
2BZ



3BZ

Inkludera nu gitter, e^- i gitter, U liten.

1D:



1BZ



2BZ



3BZ

lite mjukare

Komplikationer:

- Inte SL.
- Inte 1-atomig bas.
- Potentialen U inte $U=0$.