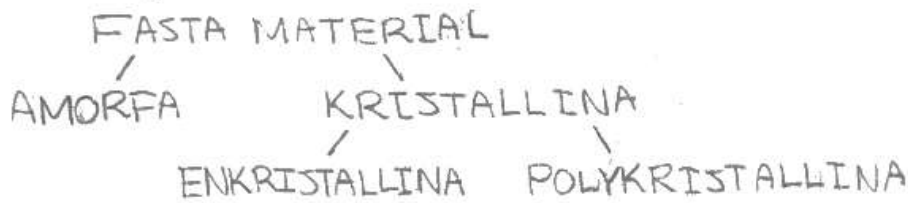


KRISTALLOGRAFI:

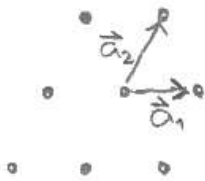
Beskrivning av hur atomerna är placerade i material.



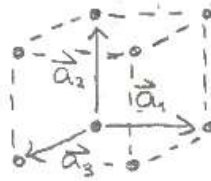
Kristaller har både närordning och fjärrordning
 \Rightarrow kan beskrivas med gitter.

Gitter - oändlig punktmängd där varje punkt har identisk omgivning.

2D:



3D:



\vec{a}_i gittervektorer $\left\{ \begin{array}{l} \text{spänner upp enhetscellen.} \\ \text{väljs s.a. man får transl. symmetri.} \end{array} \right.$

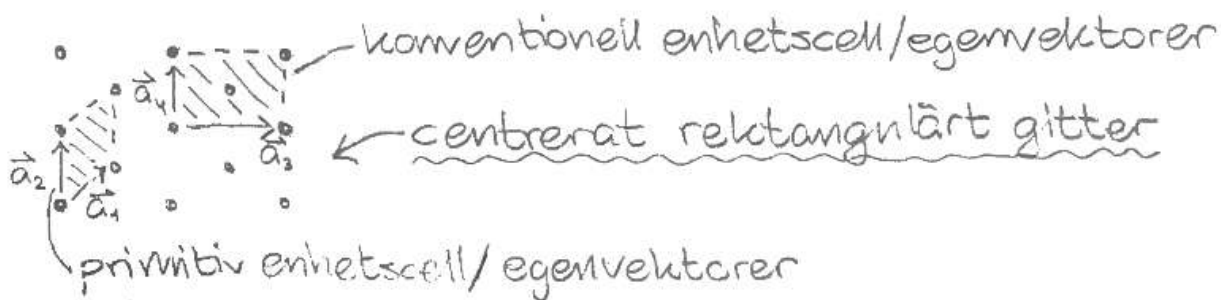
$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3), \quad u_i \text{ heltal}$$

Om \vec{a}_i väljs s.a. det bara finns en gitterpunkt i enhetscellen, är gittervektorerna och enhetscellen frimitiva.

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

2D: 5 st Bravaisgitter.

3D: 14 st Bravaisgitter.



KRISTALLPLAN:

Beskrivs med Miller-index.

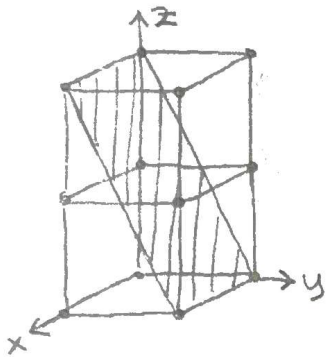
1. Tag planets skärning med \vec{a}_i .

2. Invertera $\rightarrow \frac{1}{a_i}$

Miller-index

3. Förläng s.a. alla $\frac{1}{a_i}$ blir heltal $\rightarrow (hkl)$

Ex. Kubiskt gitter.



1. Planet skär i $(\infty, 1, 2)$

2. Invertera $\rightarrow (0, 1, \frac{1}{2})$

3. Förläng $\rightarrow (0, 2, 1)$

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

Spektrikt plan $\rightarrow (hkl)$

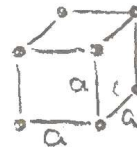
Ekvivalenta plan $\rightarrow \{hkl\}$

Spektrik. riktning $\rightarrow [hkl]$

Ekvivalenta riktningar $\rightarrow \langle hkl \rangle$

I det kubiska systemet är $[hkl] \parallel \vec{n}_{hkl}$ och planavståndet är

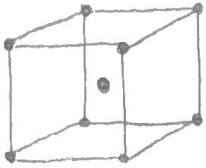
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad a \text{ gitterparametern.}$$



KRISTALLSTRUKTUR (gitter + bas)

Till varje gitterpunkt hör en eller flera atomer.

- Body centered cubic (BCC):

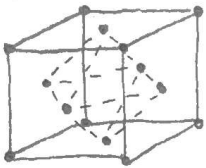


Gitterkoordinat: $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

2 atomer per cell, packningstäthet 0,68.

Ex. Fe, W, Nb.

- Face centered cubic (FCC):

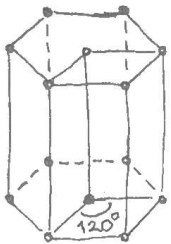


Gitterkoordinat: $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

4 atomer per cell, packningstäthet 0,74.

Ex. Al, Au, Ag, Cu, Ni.

- Hexagonal:



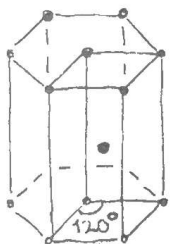
Gitterkoordinat: $(0,0,0)$.

1 atom per cell.

Packningstäthet 0,6.

Ex. Te.

- Hexagonal closed packed (HCP):



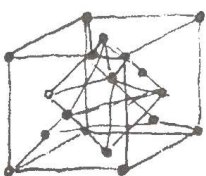
Gitterkoordinat: $(0,0,0)$, $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$.

6 atomer per cell.

Packningstäthet 0,74.

Ex. Ti, Zn, Co.

- Diamant (FCC):



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

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

8 atomer per cell, packningstäthet 0,34.

Ex. C, Si, Ge.

RECIPROKA RUMMET:

KRISTALLER

REELLA RUMMET

RECIPROKA RUMMET

- utnyttja symmetrier
- extraherar info om periodiciteterna

Kan tolkas som inverterat rum som underlättar analys.

Låt $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vara gittervektorer som beskriver gitter

$$R = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

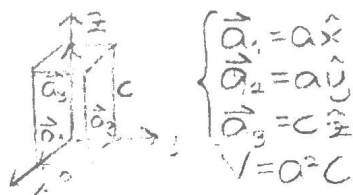
i det reella rummet. Då definieras reciproka gittervektorer $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ enligt

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V} \\ \vec{b}_2 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V} \\ \vec{b}_3 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V} \end{cases} \quad V = V_{\text{cell}} = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|$$

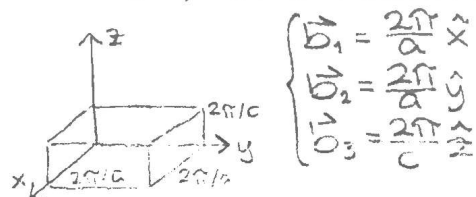
- Enheten i det reciproka rummet är m^{-1} .
- En gitterpunkt i det reciproka rummet motsvarar en planskara i det reella rummet.
- $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{om } i=j \\ 0 & \text{om } i \neq j \end{cases}$
- För plan med Miller-index (hkl) och normal \vec{n}_{hkl} gäller $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega_{hkl}} \vec{n}_{hkl}$.
- Strålar (e-, neutroner, x-ray) beskrivs med vågvektor $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$, λ våglängden.

Ex. Enkel tetragonal struktur.

Reella rummet:

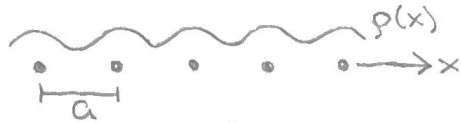


Reciproka rummet:



Ex. Endimensionellt.

Låt $\rho(x)$ vara elektrontätheten, a gitterparametern.



$$\rho(x) = C + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos\left(x \frac{2\pi n}{a}\right) + s_n \sin\left(x \frac{2\pi n}{a}\right) \quad (\text{Fourierserie})$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n \exp\left(\frac{ixn2\pi}{a}\right) \quad \text{reella Fourierkoefficienter}$$

$\rho(x)$ är en reell funktion men koefficienterna p_n är komplexa.

Exponenten $\frac{2\pi n}{a} x$ ger kedja av punkter i reciproka rummet med $\frac{2\pi}{a}$ avstånd $\frac{2\pi}{a}$ mellan punkterna.

Den reciproka gittervektorn är

$$\vec{G}_n = n \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

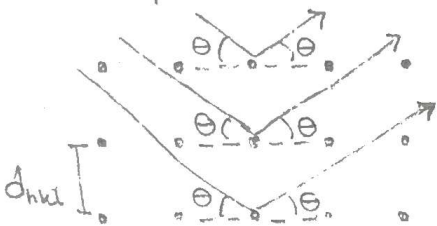
↑
heltal

DIFFRAKTION:

Studera kristallstrukturer då $\lambda < a$.

$$\lambda_{x\text{-ray}} = \frac{hc}{E}, \quad \lambda_{e^-, n} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Atomplan med avstånd d_{hkl} :



Kristallen betraktas som beståndet av delvis reflekterande atomplan.

Konstruktiv interferens \rightarrow Braggs lag gäller.

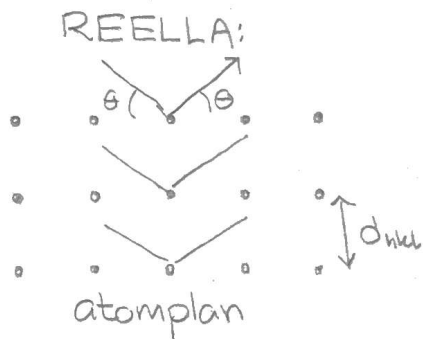
Braggs lag: $[2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda, n=1, 2, 3, \dots]$

På grund av symmetri lös villkor på h, k, l
 \rightarrow Strukturfaktor.

- SC: Inga villkor.
- FCC: h, k, l alla jämna eller udda.
- BCC: $h+k+l = \text{jämn}$.

LAUE DIFFRAKTION:

Diffraction ur det reiproka rummets perspektiv.



- Inkommande strålning beskrivs med vågvektorn \vec{k} .
- Längden $\frac{2\pi}{\lambda}$.
- Diffraakterade strålen beskrivs med \vec{k}' .
- Studerar elastisk spridning $\rightarrow |\vec{k}| = |\vec{k}'|$.
- Den spridda amplituden är proportionell mot den lokala elektrontätheten $\rho(\vec{r})$.
- Fasset mellan \vec{k} och \vec{k}' : $e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$.

Spridningsamplituden F är

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

$$\text{För 3D: } \rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

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

Detta uttryck blir $\neq 0$ om $\vec{G} = \Delta\vec{k}$

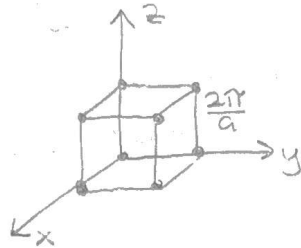
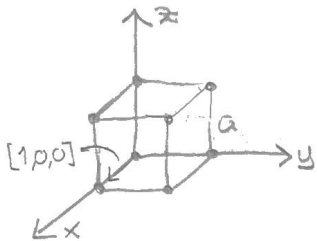
$$\Rightarrow F = V \cdot \rho_{\vec{G}}$$

Laue-villkoret för diffraction: $[\Delta\vec{k} = \vec{G}]$

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| \Rightarrow (\vec{k} + \vec{G})^2 = k'^2 = k^2 \text{ el. } 2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2 = 0$$

Ex. Röntgenstråle träffar SC-kristall med $a=30\text{\AA}$ och infallsriktningen $[1,0,0]$.

Vilken våglängd λ krävs för att erhålla diffraction från $(\bar{1}11)$ -planen?



$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} [1,0,0], \quad \vec{G} = \frac{2\pi}{a} [\bar{1},1,1]$$

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

$$|\vec{k}'|^2 = |\vec{k}|^2 \Rightarrow 4\pi \left(\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{a} \right)^2 + \frac{2}{a^2} \right) = \frac{4\pi}{\lambda^2} \Rightarrow \lambda = \frac{2a}{3} = \underline{\underline{20\text{\AA}}}$$

EWALD-KONSTRUKTION:

Användbar metod för att lösa diffractionsuppgifter.

(se ppt)

STRUKTURFAKTORN:

Spridningsamplituden längs $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$ med N enhetsceller i kristallen:

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

Strukturfaktor ger alltså spridningsamplituden för en enhetscell.

Låt f_j vara den atomära formfaktorn som ger spridningen för atom j i enhetscellen. Strukturfaktorn blir då

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

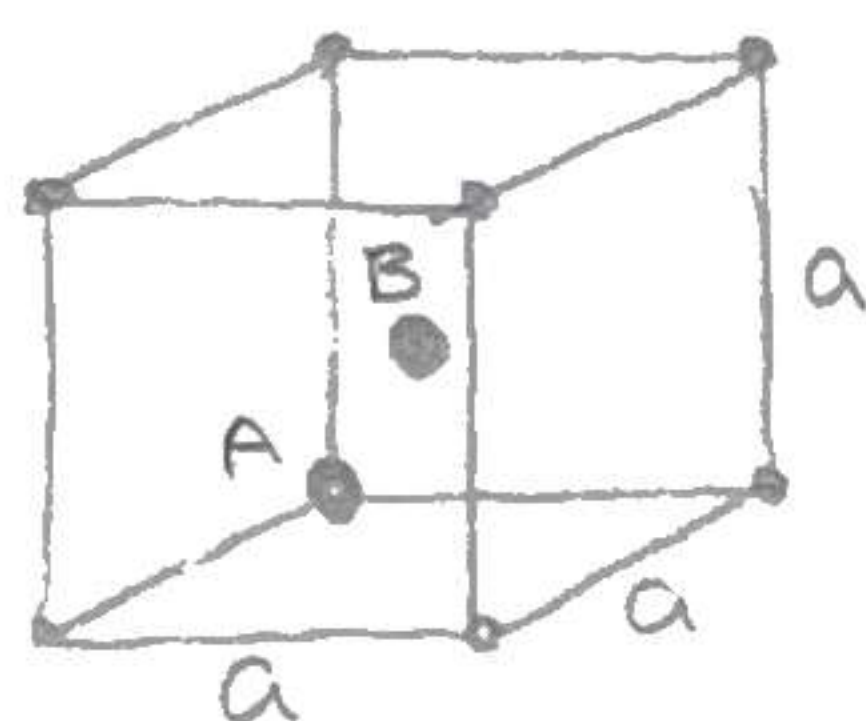
• För x-rays, $e^- \rightarrow f \sim Z$

• För neutroner $\rightarrow f$ specifik för varje isotop

Den spridda intensiteten $I_{\text{total}} \sim N^2 |S_{\text{total}}|^2$

Ex. Beräkna S för BCC.

Den konventionella enhetscellen innehåller 2 atomer. Tolka strukturen som SC med två atomer i baser.



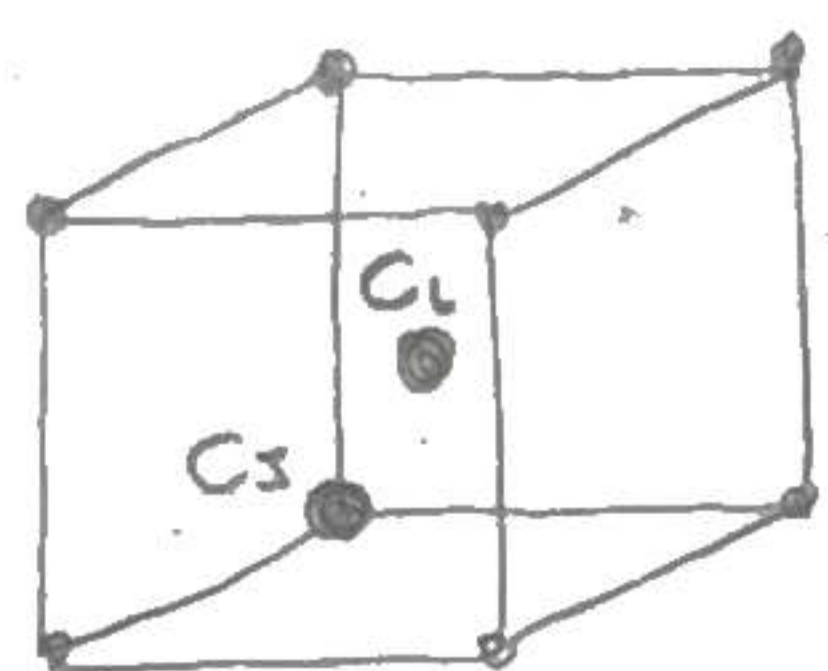
$$\vec{r}_A = [0, 0, 0], \quad \vec{r}_B = \frac{a}{2} [1, 1, 1]$$

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

$$S_{\vec{G}}(hkl) = \sum_{j=1}^2 f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j} = f_1 + f_2 e^{-i\pi(h+k+l)} =$$

$$= \{f_1 = f_2 = f\} = \begin{cases} 2f & \text{om } h+k+l = \text{jämnt} \\ 0 & \text{om } h+k+l = \text{udda} \end{cases}$$

Ex. CsCl.

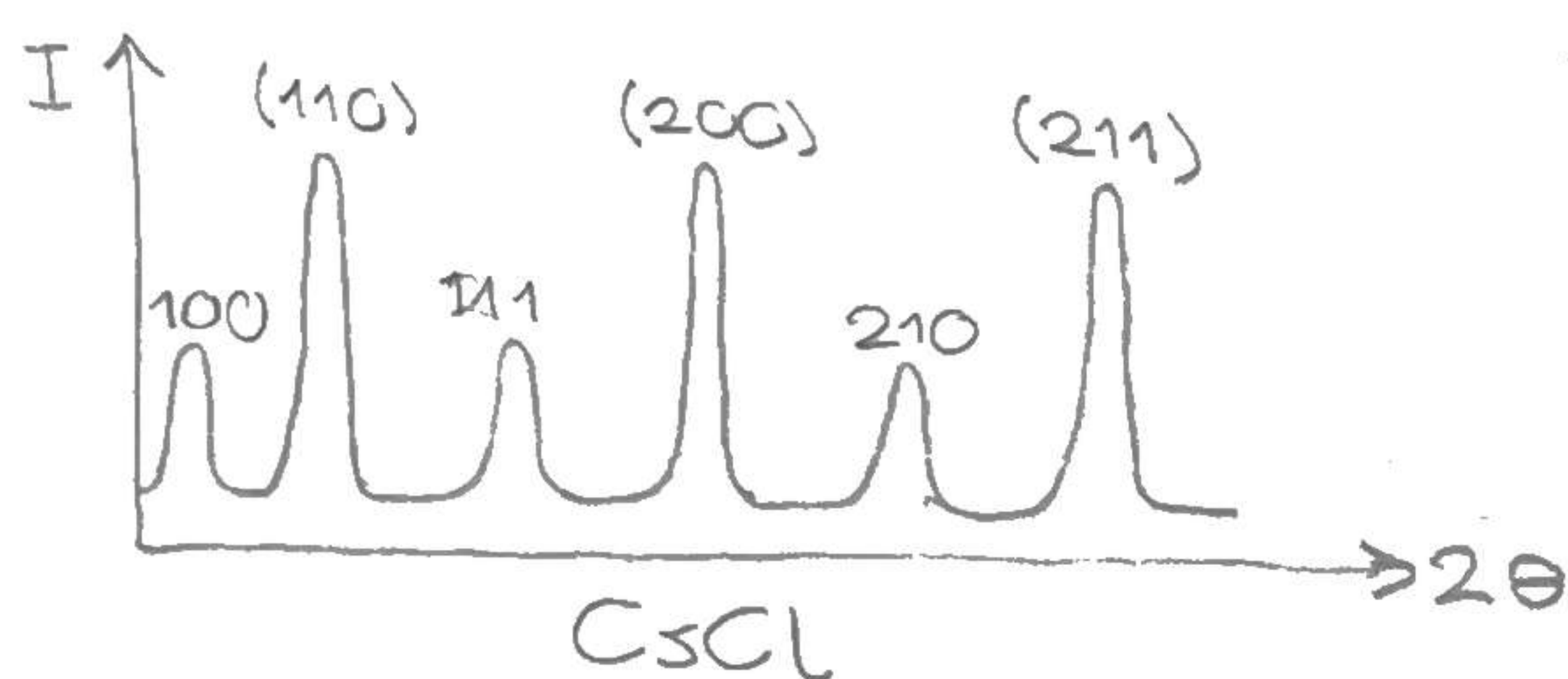
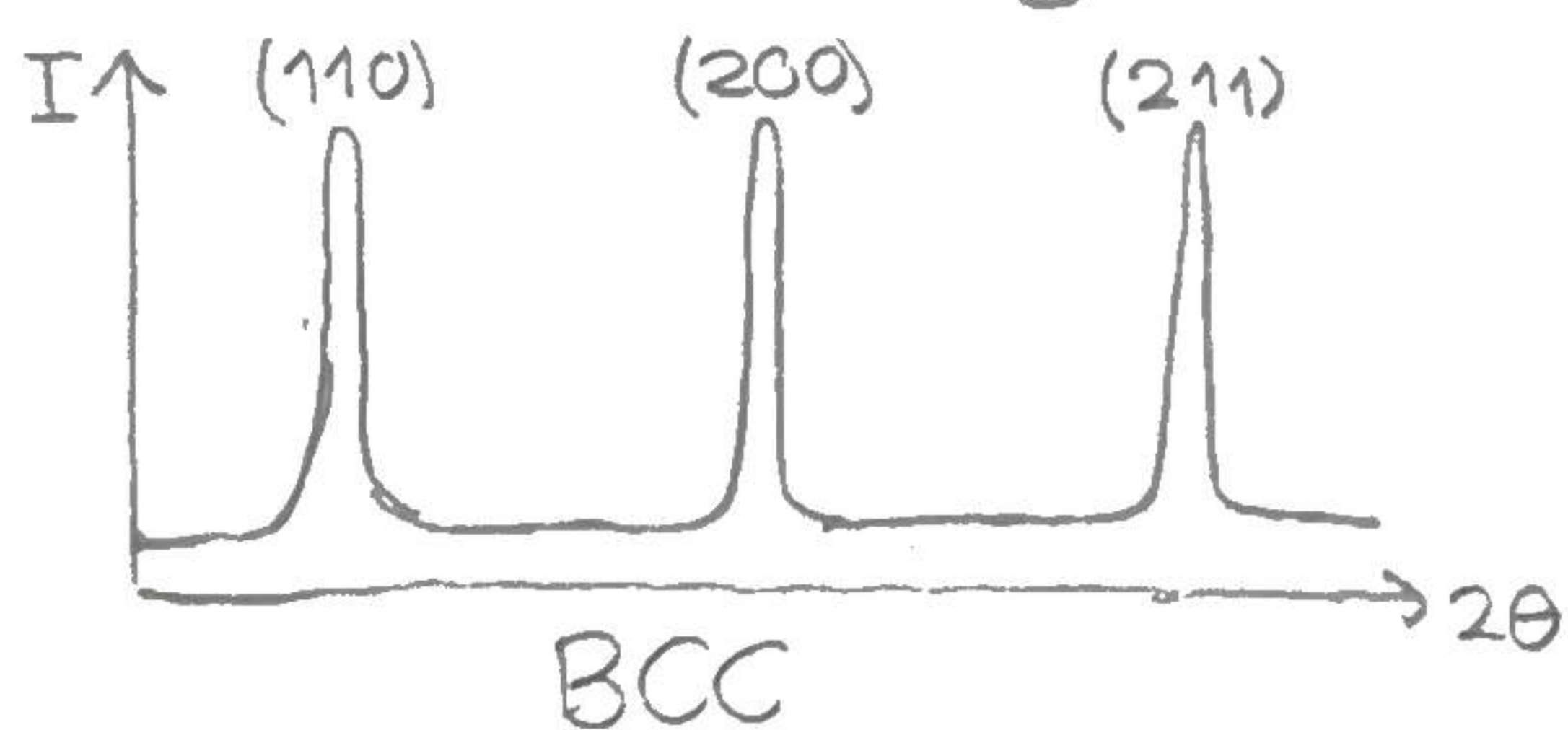


$$S_{\vec{G}}(hkl) = \begin{cases} f_{Cs} + f_{Cl} & \text{om } h+k+l = \text{jämnt} \\ f_{Cs} - f_{Cl} & \text{om } h+k+l = \text{udda} \end{cases}$$

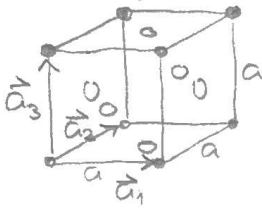
För röntgen och e^- : $f_{Cs} \approx c \cdot 55$, $f_{Cl} \approx c \cdot 17$
 $\uparrow z_{Cs}$ $\uparrow z_{Cl}$

$$\Rightarrow S_{\vec{G}}(hkl) = \begin{cases} c \cdot 72 & \text{om } h+k+l = \text{jämnt} \\ c \cdot 38 & \text{om } h+k+l = \text{udda} \end{cases}$$

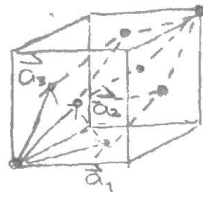
Diffractionsdiagram för BCC resp. CsCl:



Konventionell:



Primitiv:



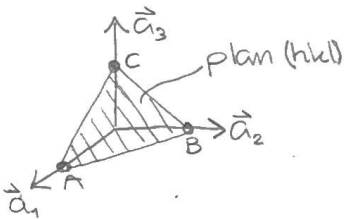
$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1, 1, 0) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(0, 1, 1) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 0, 1) \end{cases}$$

$$V_{\text{primitiv}} = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{a^3}{4} \quad (\text{volym av parallelepiped})$$

vilket är en fjärdedel av den konventionella cellens volym.

S10 Visa att $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$.

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (\text{reciprok gittervektor})$$



$$\vec{AB} \cdot \vec{G}_{hkl} = \left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h}\right) \cdot (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3) =$$

$$= \{ \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \} = 0$$

$$\vec{BC} \cdot \vec{G}_{hkl} = \dots = 0$$

$$\Rightarrow \vec{G}_{hkl} \perp (hkl)$$

Projicera vektor som går mellan flera plan på $\vec{n} = \frac{\vec{G}_{hkl}}{|\vec{G}_{hkl}|}$.

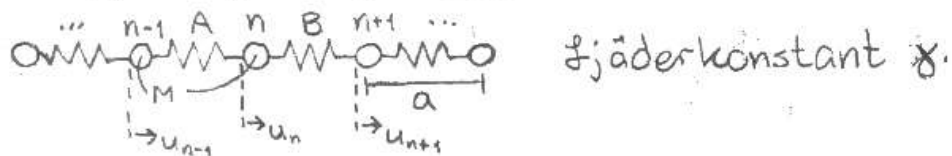
$\frac{\vec{a}_1}{h}, \frac{\vec{a}_2}{k}, \frac{\vec{a}_3}{l}$ går mellan planen.

$$d_{hkl} = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \vec{n} = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{G}_{hkl}}{h|\vec{G}_{hkl}|} = \{ \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \} = \frac{2\pi h}{h|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

GITTERVIBRATIONER: (4.1)

Vilka frekvenser kan ett gitter svänga med?

Oändligt lång kedja av atomer (1D):



Låt u_n vara utslaget från jämviktsläget för atom n .

Kräften på n från fjäder A och B :

$$F_A = \gamma(u_{n-1} - u_n), \quad F_B = \gamma(u_{n+1} - u_n) \quad (\rightarrow)$$

Totala kräften:

$$F_n = F_A + F_B = \gamma(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n)$$

Newtons andra lag ($F=ma$):

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\gamma(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \quad (1)$$

Ansätt våglösning:

$$u_n = u e^{i(kan - \omega t)}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad u \text{ konst.}$$

Insättning i (1):

$$-M\omega^2 e^{ikan} = -\gamma e^{ikan} (2 - e^{-ika} - e^{ika})$$

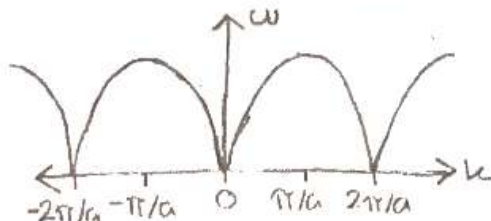
$$\Rightarrow M\omega^2 = \gamma(2 - 2\cos ka)$$

$$\Rightarrow \omega(k) = \sqrt{\frac{2\gamma(1 - \cos ka)}{M}}$$

Med $\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$:

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

Detta är en dispersionsrelation.



För små k (länga λ): ($\sin \frac{ka}{2} \approx \frac{ka}{2}$)

$$\omega(k) = a\sqrt{\frac{\rho}{M}}k \Rightarrow$$

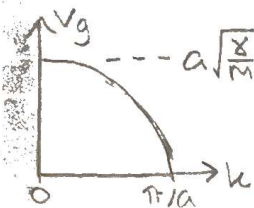
$$\Rightarrow \{v = \lambda f = \frac{\omega}{k} \Rightarrow \omega = vk\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow [v_g = a\sqrt{\frac{\rho}{M}}] \text{ ljudhastigheten.}$$

För stora k (korta λ):

$$\omega_{\max} = \lambda\sqrt{\frac{\rho}{M}}$$

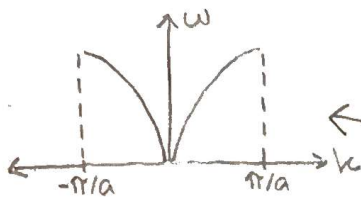
$$\Rightarrow [v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = a\sqrt{\frac{\rho}{M}} \cos \frac{ka}{2}] \text{ grupphastigheten.}$$



Vid $k = \frac{\pi}{a}$ blir $v_g = 0$

\Rightarrow stående våg.

Det relevanta k -området är $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$.



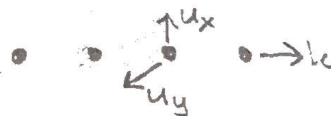
Detta kallas första Brillouin zonen.

Eftersom vi endast är intresserade av utslag i atomernas positioner, kan k -värden utanför 1BZ återföras till ekvivalent position i 1BZ.

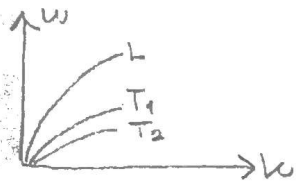
$$(3D) \left[\begin{aligned} k &= k_{1BZ} + m \frac{2\pi}{a} \\ \vec{k} &= \vec{k}_{1BZ} + \vec{G}_{mkl} \end{aligned} \right]$$

- 1D-analysen fungerar även i 3D (antag att atomplan svänger).
- Vågor kan vara longitudinella och transversella vågor.

Longitudinell: (1st) Transversell: (2st)



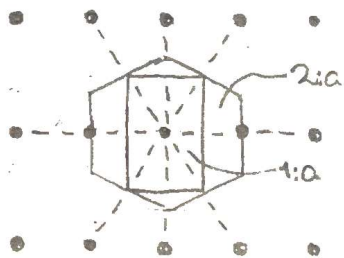
- Tre grenar ("branches") (en longitudinell, två transversella) i dispersionsrelationen.
- Dessa kan överlappa - degenererade.



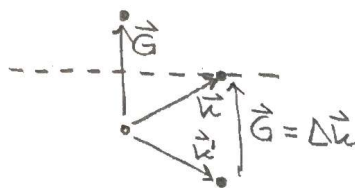
Brillouin zoner:

- 1BZ motsvarar Wigner-Seitz cell i det reciproka rummet.
- Brillouin zoner konstrueras genom att rita plan vinkelrätt mot alla $\vec{G}/2$ (likt för Wigner-Seitz cell).

Ex. rektangulärt gitter i 2D:

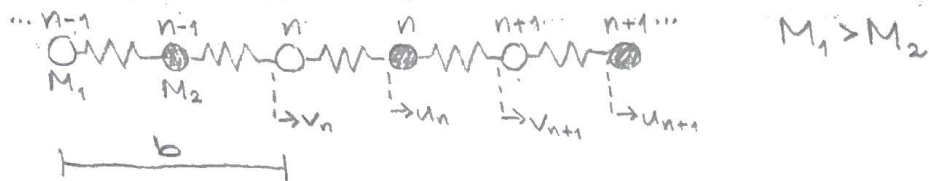


- Alla Brillouin zoner har samma area (i 2D).
- Om \vec{k} för t.ex. röntgenstråle ligger på BZ-gräns är Laue-villkoret uppfyllt och man får diffraction.



Se bl.a. Physics för 3D Brillouin zoner.

Oändligt lång kedja med två atomer i basen:



u_n och v_n betecknar avvikelser från jämviktsläget. Krafter + Newtons andra lag ger (ukt sist):

$$\begin{cases} M_1 \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\gamma(2u_n - v_{n-1} - v_n) & (1) \\ M_2 \frac{d^2 v_n}{dt^2} = -\gamma(2v_n - u_{n-1} - u_n) & (2) \end{cases}$$

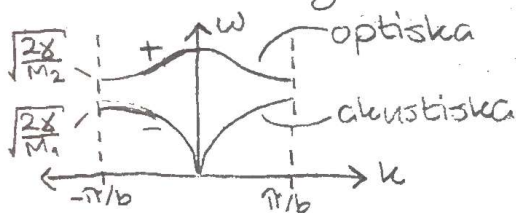
Ansätt våglösning:

$$\begin{cases} u_n = u e^{inkb} e^{-i\omega t}, & u \text{ konst.} \\ v_n = v e^{inkb} e^{-i\omega t}, & v \text{ konst.} \end{cases}$$

Sätt in i (1) och (2):

$$\left[\omega^2 = \gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \gamma \left(\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{kcb}{2} \right)^{1/2} \right] \leftarrow \text{(kan vara bra på surklapp inför tentan)}$$

Två lösningar \rightarrow två grenar i dispersionsrelationen.



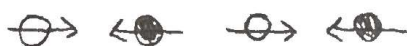
$$\omega_{opt}^{max} = \omega_{opt}(0) = \sqrt{2\gamma \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$$

Nära Brillouinzon-gränsen \rightarrow endast M_1 resp. M_2 påverkar svängningarna.

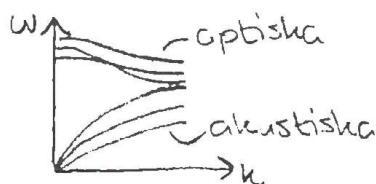
För små k i akustiska grenen:

$$\omega_{akust} = \sqrt{\frac{\gamma/2}{M_1 + M_2}} bk = v_g k \Rightarrow \left[v_g = \sqrt{\frac{\gamma/2}{M_1 + M_2}} b \right] \text{ grupphastigheter}$$

I den optiska grenen rör sig M_1 och M_2 i motsättas:



Transversella och longitudinella grenar:



[Med p atomer i basen (primitiva enhetscellen) fås $N=3p$ grenar.
3 akustiska, $3p-3$ optiska]

Grenarna kan vara degenererade.

I 3D: olika dispersionsrelationer i olika riktningar.

Ändlig kedja av atomer - tillåtna k -värden:

Kedja med längd $L = a(N+1) \approx \{N \gg 1\} \approx aN$

Inför periodiska randvillkor:

$$u_{N+n}(t) = u_n(t) \Rightarrow u e^{i(kn + kL - \omega t)} = u e^{i(kn - \omega t)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow e^{ikL} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{L} m = \frac{2\pi}{aN} m, \quad m \text{ heltal.} \Rightarrow$$

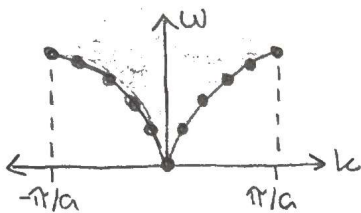
$$\Rightarrow k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \pm |k_{\max}|.$$

I 1B2:

$$\pm |k_{\max}| = \pm \frac{2\pi}{L} m_{\max} \leq \frac{\pi}{a} \Rightarrow m_{\max} = \frac{L}{2a} = \frac{N}{2}.$$

Eftersom $L \gg a$, finns det väldigt många tillåtna k -värden. k är kvantiserad.

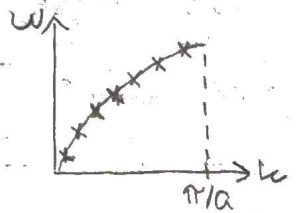
Ex. $L = 10a$ (11 atomer).



$$\Delta k = \frac{2\pi}{10a} = \frac{\pi}{5a}$$

$$m_{\max} = 11$$

Antal tillåtna k -värden är 11.



Kvantiserade energinivåer - fononer:

Energien för gittersvängningar är kvantiserad (jämför fotoner och elektromagnetism), enligt

$$[E_l(\omega) = (l + \frac{1}{2})\hbar\omega]$$

där l är ett kvanttal som beskriver hur många fononer som finns i moden med vinkelfrekvens ω .

En excitation

$$[\Delta E = \hbar\omega]$$

motsvarar en fonon.

Fononer kan tolkas som partiklar (kvasipartiklar)
P.s.s. som för fotoner.

L är relaterat till amplituden enligt

$$u^2 = 4\left(1 + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{\rho v \omega}$$

ΔE brukar vara i storleksordning MeV.

Inelastisk spridning:

Gittersvängningar kan betraktas som partiklar -
fononer (\vec{q}), eller vågor.

En inkommande γ , x , e^- , n med vågvektor \vec{k} sprids
mot gittret s.a. vågvektorn ändras till \vec{k}' !

Om $|\vec{k}'| > |\vec{k}|$ har en fonon absorberats.

Om $|\vec{k}'| < |\vec{k}|$ har en fonon emitterats.

\vec{q} måste ligga i 1BZ

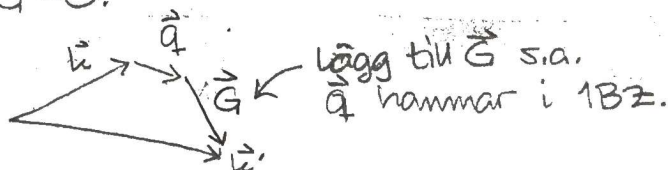
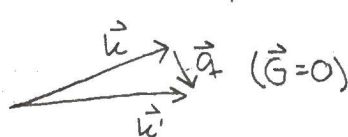
$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}' + \vec{q}$$

Totala energin konserveras (\vec{G} mottar ej energi).

Fotoner: $\omega = \omega' \pm \omega_q$

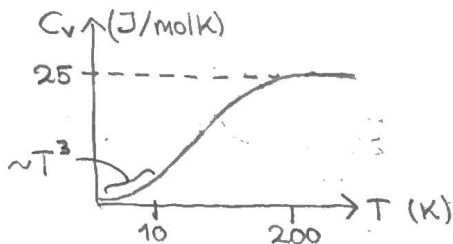
Neutroner: $\frac{\hbar k^2}{2M_n} = \frac{\hbar k'^2}{2M_n} \pm \omega_q$

Ofta är \vec{q} liten, $\vec{G} = 0$.



VÄRMEKAPACITIVITET: (4.2)

Def. $\left[C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \Big|_v \right]$

Experiment och modeller:Dulong-Petits lag:

$$[C_v(T \rightarrow \infty) = 3R \approx 25 \text{ J/molK}]$$

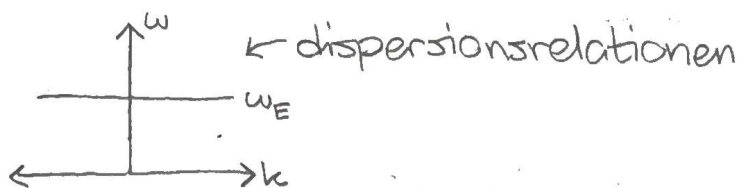
• För höga T : $C_v = 3k_B N_A = 3R \approx 25 \text{ J/molK}$.

• För låga T : (metall): $C_v = \alpha T + \beta T^3$.
↑ pga elektroner ↓ pga gitter

• Klassisk statistisk fysik (ekvipartitionsprinc.): $C_v = 3k_B N_A$.

Einsteins modell:

Betrakta 1 mol (N_A) oberoende harmoniska oscillatorer med samma vinkelrelvens ω_E .

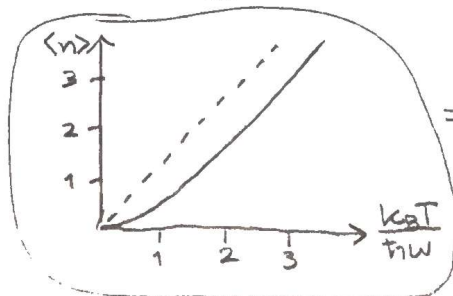


Energi: $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_E$.

Tidsmedelvärdet av E , n är $\langle E \rangle$, $\langle n \rangle$.

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega_E / k_B T} - 1} \Rightarrow \langle E \rangle = 3N_A \left(\frac{1}{e^{\hbar \omega_E / k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_E \Rightarrow$$

↑ antal frihetsgrader



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

(Höga T : $C = 3N_A k_B$)

ω_E anpassas efter experiment och är olika för olika ämnen

Inför $\Theta_E = \frac{h\nu_E}{k_B}$ Einsteintemperatur.

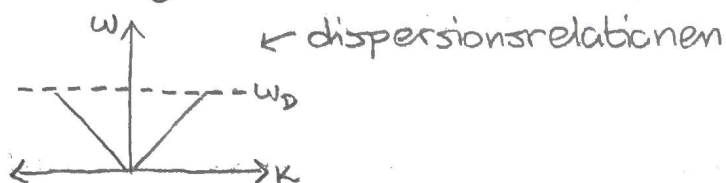
$$\Rightarrow C = 3N_A k_B \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2}$$

Θ_E finns i tabeller och är en bra modell vid höga T ,

Vid låga T går C för snabbt mot 0, alltså inte bra modell. Den lägsta excitationen är för stor ($h\nu_E$) $\Rightarrow \langle E \rangle \sim \text{konst} \Rightarrow C \sim 0$.

Debyes modell:

Antag $\omega = vk$ för $\omega < \omega_D$.



Energitidsmedelvärdet:

$$\langle E \rangle = \int_0^{\omega_D} g(\omega) \langle n(\omega) \rangle h\omega d\omega$$

\swarrow tillståndstätheten \nwarrow $+\frac{1}{2}$ tar ut sig senare

Tillståndstäthet:

I k -rummet: ($k = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots$)

• 1D: $g(k) = \frac{L}{2\pi}$

• 2D: $g(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2$

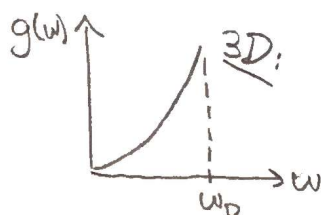
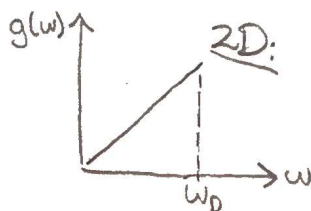
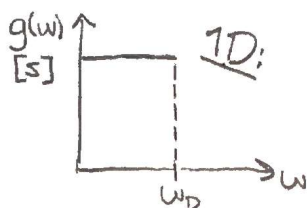
• 3D: $g(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$

I ω -rummet: ($\omega = vk$) \swarrow pga en ω ger $\pm k$.

• 1D: $g(\omega) = 2g(k) \frac{dk}{d\omega} = 2 \cdot \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{1}{v} = \frac{L}{\pi v}$

• 2D: $g(\omega) = g(k) \frac{d^2k}{d\omega^2} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2\pi k \frac{dk}{d\omega} = \frac{L^2}{2\pi v^2} \omega$

• 3D: $g(\omega) = g(k) \frac{d^3k}{d\omega^3} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot 4\pi k^2 \cdot \frac{dk}{d\omega} = \frac{L^3}{2\pi^2 v^3} \omega^2$



$L^3 = V$, 3 grenar (2 long., 1 trans.) \Rightarrow

$$\langle E \rangle = 3 \int_0^{\omega_D} g(\omega) \langle n(\omega) \rangle \hbar \omega d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega.$$

ω_D fås från antalet atomer N :

$$N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} d\omega = \frac{V\omega_D^3}{6\pi^2 v^3} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \omega_D^3 = \frac{6\pi^2 v^3}{V} N.$$

Indör $\Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$ Debyetemperaturen.

Med $x_D = \frac{\Theta_D}{T}$:

$$\langle E \rangle = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \text{ (inga analytiska lösni.)}$$

• För höga T : $C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3Nk_B.$

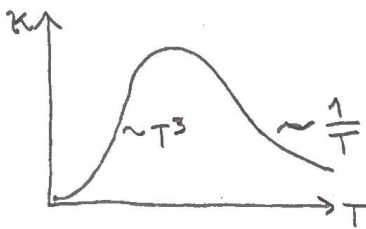
• För låga T : $C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \sim T^3.$

Debye-modellen funkar alltså bättre vid låga T .

Värmeledning:

Värmeledning: $j = -\kappa \frac{dT}{dx}$ (W/m^2).

κ värmeledningsförmåga. (W/mK)



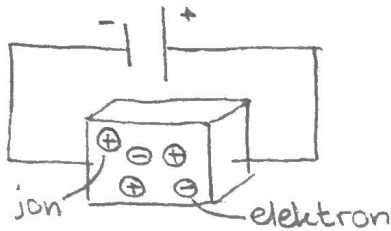
$$\kappa_{tot} = \kappa_k + \kappa_e$$

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

l frimedelvåglängd för fononer
 $\langle v \rangle$ fononernas medelhastighet

medellängden en fonon färdas utan att krocka

κ bestäms bla av provstorlek.

Drudemodellen:

Rörelseekv. (Newton II):

$$\begin{cases} m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F} = \vec{F}_L + \vec{F}_D \\ \vec{F}_L = q\vec{E} = -e\vec{E}, \quad \vec{F}_D = -m \frac{\vec{v}}{\tau} \end{cases}$$

↑ av elektriskt fält
↑ av dämpning

Behövs både F_L och F_D ?

• Utan dämpning:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} \Rightarrow \vec{v} = \vec{v}_0 - \frac{e\vec{E}}{m} t \quad \text{⚡}$$

• Utan elektriskt fält:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -m \frac{\vec{v}}{\tau} \Rightarrow \vec{v} = \vec{v}_0 e^{-t/\tau} \quad \text{⚡}$$

Ja, båda termerna behövs!

Antag stationärt flöde:

Driktthastighet $\vec{v}_D = \langle \vec{v} \rangle$ ← medelhastigheten av alla elektroner

$$\frac{d\vec{v}_D}{dt} = -e\vec{E} - m \frac{\vec{v}_D}{\tau} = 0 \Rightarrow \left[\vec{v}_D = -\frac{e\tau}{m} \vec{E} \right]$$

Strömtäthet:

$$\vec{J} = \underbrace{n}_{\text{elektron-täthet}} \cdot \underbrace{(-e)}_{\text{elektron-laddning}} \cdot \underbrace{\left(-\frac{e\tau}{m} \vec{E}\right)}_{\text{genomsnittlig hastighet}} = \underbrace{\frac{ne^2\tau}{m}}_{\sigma} \vec{E}$$

σ Drudekonduktiviteten

$$\vec{E} = \sigma^{-1} \vec{J}, \quad U = RI \Rightarrow \{U \sim E \cdot \text{längd}, I = J \cdot \text{area}\} \Rightarrow \left[\sigma^{-1} = R \frac{\text{area}}{\text{längd}} \right]$$

Värmekapacitet:

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

Kinetisk energi är $\frac{3}{2} k_B T$.

För Drudeelektroner:

$$\frac{\text{kin. energi elektron}}{\text{elektron}} = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow \frac{C_V}{\text{elektron}} = \frac{3}{2} k_B \Rightarrow \frac{C_V}{\text{mol}} = 3N k_B = 3R$$

Ex: 1 mol Na (1 valenselektron)

N_A joner + N_A elektroner.

Antag $T > T_{\text{Debye}} \sim 200\text{K}$.

$$\frac{C_v}{\text{jon}} = 3k_B \Rightarrow \frac{C_v}{\text{mol}} = 3Nk_B = 3R$$

Totalt:

$$\frac{C_v}{\text{mol}} = 3R + \frac{3}{2}R = 4,5R$$

↙ Drudeelektronernas bidrag

Men enligt experiment fås $C_v \approx 3R$ (Dulong-Petit).

→ Alltså är Drudemodellen ej bra för värmekapacitet!

Elektronen som kvantgas:

- Valenselektroner + joner, $M_{\text{jon}} \gg m_e$
- Born-Oppenheimers approximation
- Antag att elektroner ej växelverkar

En elektron:

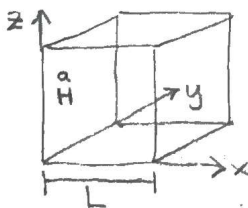
Schrödingerekv:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (V(\vec{r})=0 \text{ by fri elektron})$$
$$\Rightarrow \Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Energi:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

Randvillkor:



Antag periodiska randvillkor:

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

$$\Rightarrow A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} = A e^{i(k_x(x+L) + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\Rightarrow 1 = e^{ik_x L} \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L} \cdot n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

På samma sätt för y, z ger villkor på \vec{k} :

$$k_x = \frac{2\pi}{L} \cdot n, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} \cdot n, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} \cdot n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

I x -riktning:

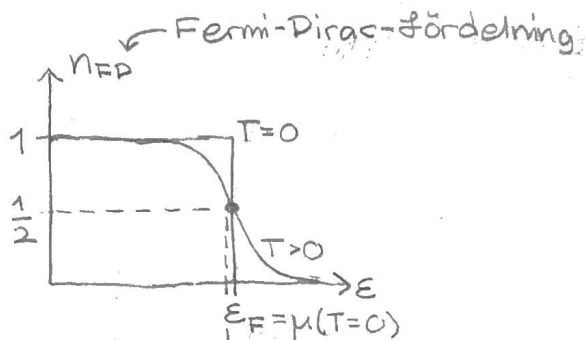
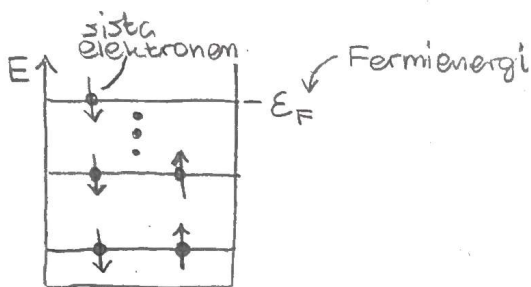
$$\lambda = \frac{2\pi}{k_x} = \frac{L}{n_x} \Rightarrow L = n_x \lambda$$

Kvanttillstånd:

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

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

Enelektronmodell:

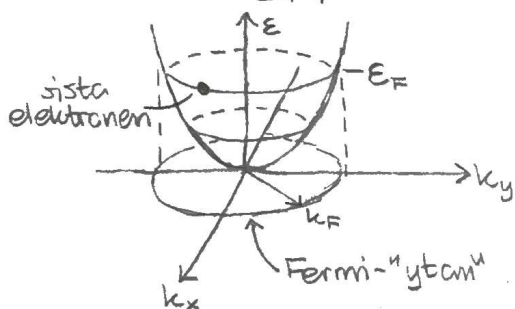


Fermi-Dirac-fördelningen:

$$N_{FD}(E_k) = \frac{1}{e^{(E_k - \mu)/k_B T} + 1}$$

2D:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2$$

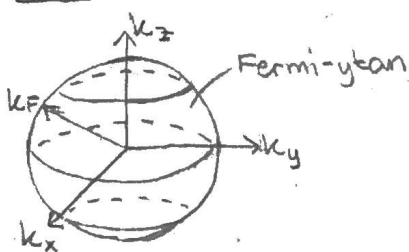


Hur många elektroner?

$$N_{tot} = \int_0^{E_F} D(E) dE = \int_0^{k_F} D(k) d^3k \quad \leftarrow 3D$$

$D(E), D(k)$ tillståndstätheter.

3D:



$$D(k) = \frac{L^3}{4\pi^3} = \frac{V}{4\pi^3} \quad (3D)$$

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

$$\Rightarrow [N_{tot} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3]$$

$$\text{Elektronstäthet } n = \frac{N_{\text{tot}}}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

$$\Rightarrow [k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}]$$

$$\Rightarrow [E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}]$$

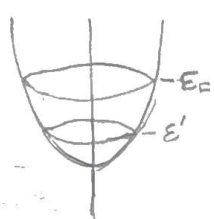
$$\Rightarrow T_F = \frac{E_F}{k_B} \sim 10^5 \text{ K } \text{Fermitemperaturen}$$

Ex: Metall.

$$n \approx 10^{30} \text{ m}^{-3}$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \approx 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

$$\text{Reziproka gitteravståndet } \frac{2\pi}{a} \approx 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

Elektronen som kvantgas: (forts.)

$$N(\epsilon') = \int_0^{\epsilon'} D(\epsilon) d\epsilon \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{D(\epsilon)} = \frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon} = \left\{ N(\epsilon) = \frac{V}{3\pi^2} k^3 = \frac{V}{3\pi^2} (2m\epsilon)^{3/2} \frac{1}{\hbar^3} \right\} =$$

$$= \frac{3}{2} \sqrt{\epsilon} \frac{V}{3\pi^2 \hbar^3} (2m)^{3/2} = \left\{ N_{\text{tot}} = \frac{V}{3\pi^2 \hbar^3} (2m\epsilon_F)^{3/2} \right\} =$$

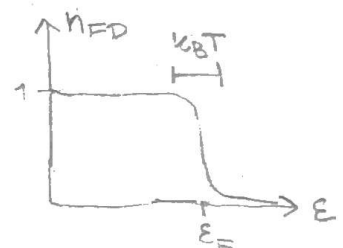
$$= \boxed{\frac{3}{2} \frac{N_{\text{tot}}}{\epsilon_F^{3/2}} \sqrt{\epsilon}} \quad (\text{i 3D})$$

Värmekapacitet:

Antag $T \neq 0$, $T \ll T_F$.

$$\mu(T) \approx \epsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots \right) \approx \{ T \ll T_F \} \approx \epsilon_F$$

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



Energiökning från $T=0$ till $T>0$:

$$\begin{aligned} \Delta E &= E(T) - E(0) \approx (\# e^- \text{ inom } k_B T\text{-bredd}) \cdot (\text{termisk } E \text{ per } e^-) = \\ &= k_B T D(\epsilon_F) \cdot \frac{3}{2} k_B T = \frac{9}{4} (k_B T)^2 \frac{N_{\text{tot}}}{\epsilon_F} \end{aligned}$$

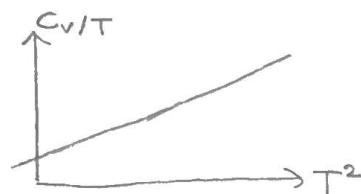
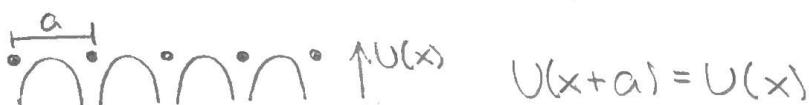
Värmekapaciteten blir då:

$$C_V = \frac{dE}{dT} \approx \frac{\Delta E}{\Delta T} = \frac{9}{4} k_B^2 \frac{N_{\text{tot}}}{\epsilon_F} T = \frac{9}{4} k_B N_{\text{tot}} \frac{T}{T_F}$$

$$C_V / \text{mol} = \frac{9}{4} R \frac{T}{T_F} \quad (\text{i verkligheten: } C_V / \text{mol} = \frac{\pi^2}{2} R \frac{T}{T_F})$$

Totalt:

$$C_V = AT^3 + \gamma T \Rightarrow \frac{C_V}{T} = AT^2 + \gamma$$

Elektroner i periodisk potential:

Bloch's teorem: $[\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r})]$ ↑ periodisk i a

• L-periodicitet Ψ :

$$\Psi_{\vec{k}}(x+L) = e^{i\vec{k}(x+L)} U_{\vec{k}}(x+L) = \{L = n \cdot a\} = \underbrace{e^{i\vec{k}L}}_{=1} \underbrace{e^{i\vec{k}x} U_{\vec{k}}(x)}_{=\Psi_{\vec{k}}(x)} = \Psi_{\vec{k}}(x)$$

• a-periodicitet $|\Psi|^2$:

$$|\Psi|^2 = 1 \cdot |U_{\vec{k}}(x+a)|^2 = |U_{\vec{k}}(x)|^2 = |\Psi_{\vec{k}}(x)|^2$$

Från kvantfysik:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Rightarrow U(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \bar{U}_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

reciprola
nummet

TOSE: (1D)

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x) \Rightarrow \dots \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \bar{U}_{\vec{q}} C_{\vec{k}-\vec{q}} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \bar{U}_{\vec{q}} C_{\vec{k}-\vec{q}} = 0$$

För k_0 :

$$(G = \frac{2\pi}{a})$$

$$\dots + \underbrace{U_{-G} C_{k_0+G}}_{q=-G} + \underbrace{\left(\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - E(k_0) \right) C_{k_0}}_{q=0} + \underbrace{U_G C_{k_0-G}}_{q=+G} + \dots = 0$$

Analogt för $k = k_0 + G$, $k = k_0 - G$ osv.

$$\begin{bmatrix} \dots & \frac{\hbar^2(k-G)^2}{2m} - E_k & & U_{-G} & U_{-2G} & \dots \\ \dots & U_G & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_k & & U_{-G} & \dots \\ \dots & U_{2G} & U_G & \frac{\hbar^2(k+G)^2}{2m} - E_k & \dots & \dots \\ \vdots & & \vdots & & & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ C_{k-G} \\ C_k \\ C_{k+G} \\ \vdots \end{bmatrix} = 0$$

$$\Psi_{k_0}(x) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} e^{i\vec{k}x} = \sum_{\vec{q}} C_{k_0-\vec{q}} e^{i(k_0-\vec{q})x} = e^{ik_0x} \underbrace{\sum_{\vec{q}} C_{k_0-\vec{q}} e^{-i\vec{q}x}}_{\text{periodisk i a}} = e^{ik_0x} U_{k_0}(x)$$

$$\Psi_{k_0+q} = \Psi_{k_0} \Rightarrow E_{k_0+q} = E_{k_0}$$

(räcker att lösa TOSE i 1BZ)

Elektron i elektrisk potential: (Forts.)

Studera energi i $k = \frac{\pi}{a}$.

Antag $U_G = U_{-G} = U$ och att andra $U_q = 0$.

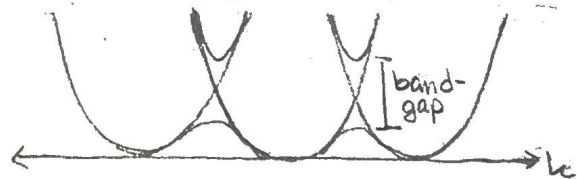
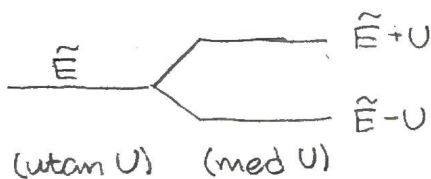
Antag $C_k, C_{k_0-G} \neq 0$ och att andra $C_{k_0+q} = 0$.

Skriv $\tilde{E} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}$.

$$\Rightarrow \begin{cases} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k_0-G)^2 - E_{k_0} \right) C_{k_0-G} + U C_{k_0} = 0 \\ U C_{k_0-G} + \left(\frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 - E_{k_0} \right) C_{k_0} = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (\tilde{E} - E_{k_0}) C_{-\pi/a} + U C_{\pi/a} = 0 \\ U C_{-\pi/a} + (\tilde{E} - E_{k_0}) C_{\pi/a} = 0 \end{cases}$$

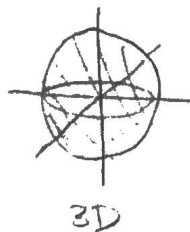
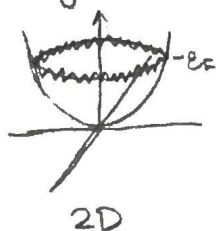
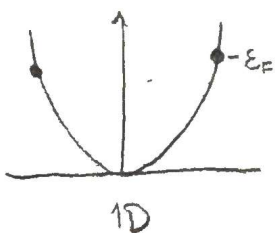
$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \tilde{E} - E_{k_0} & U \\ U & \tilde{E} - E_{k_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{-\pi/a} \\ C_{\pi/a} \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow E_{k_0} = \tilde{E} \pm U$$

Fermiytor:

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

- 1D: punkter
- 2D: linjer
- 3D: ytor

Fermiytor är viktiga för metaller. Elektriska egenskaper bestäms av ändringar i antal tillstånd nära Fermienergin.



Dynamik för elektroner:

Fri elektron:

- $\Psi_{\text{fri}} = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
- Hela universum
- Vågpaket för lokaliserad våg
→ superpos. av fria vågor
- Grupp hastighet: $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$
- Rörelsemoment: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

Blochelektron: (i periodiskt material)

- $\Psi_{\text{Bloch}} = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$
- Hela materialet
- Vågpackets hastighet
 $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\vec{k}}}{\partial k}$ (1D)
 $v_g = \nabla_{\vec{k}} \omega = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}}$ (3D)
- $\hbar k$ ej rörelsemoment

För Blochelektron:

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}}$$

$$-i\hbar \nabla_{\vec{r}} \Psi_{\text{Bloch}} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}} (A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})) = \hbar k \Psi_{\text{Bloch}} - i\hbar A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \nabla_{\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Ψ_{Bloch} ej egenfunktion för \hat{p} .

$\hbar k$ kallas gittermoment

Rörelseekvation:

$$\frac{dE}{dt} = F v_g, \quad \vec{F} \text{ yttre kraft}$$

$$1D: \frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt} = \{E = \hbar \omega\} = \hbar \frac{d\omega}{dk} \frac{dk}{dt} = \hbar v_g \frac{dk}{dt}$$

$$\Rightarrow \hbar v_g \frac{dk}{dt} = F v_g \Rightarrow \left[F = \hbar \frac{dk}{dt} \right]$$

Bloch-elektroner:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}$$

$$\begin{aligned} \text{1D: acceleration: } \frac{dv_g}{dt} &= \frac{\partial v_g}{\partial k} \frac{dk}{dt} = \left\{ v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \left\{ E = \hbar \omega \right\} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \right\} = \\ &= \frac{d}{dk} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \right) \frac{F}{\hbar} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F \\ &\quad \text{motsv. } m^{-1} \end{aligned}$$

$$\text{Fri elektron; } E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Rightarrow \frac{1}{m_{\text{eff}}} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar^2}{m_e} = \frac{1}{m_e}$$

mess effektiva massan

$$\begin{aligned} \text{3D: } a_i &= \frac{\partial}{\partial t} v_{g,i} = \nabla_k v_{g,i} \cdot \frac{dk}{dt} = \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial v_{g,i}}{\partial k_j} \frac{dk_j}{dt} = \left\{ v_{g,i} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_i} \right\} = \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i} \frac{dk_j}{dt} = \left\{ \frac{dk_j}{dt} = \frac{F_j}{\hbar} \right\} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_j \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i} \right)_{ji} F_j = \\ &= \sum_j \left(\frac{1}{m_{\text{eff}}} \right)_{ji} F_j \\ &\quad \uparrow \text{matrix} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \vec{a} = \left(\frac{1}{m_{\text{eff}}} \right) \vec{F}$$

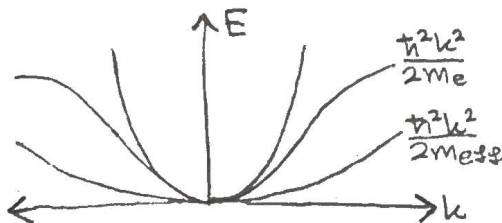
$$\text{Fri elektron: } E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_e}$$

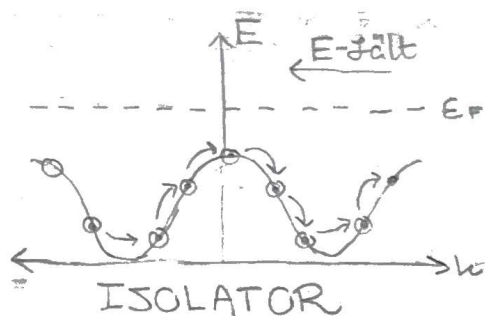
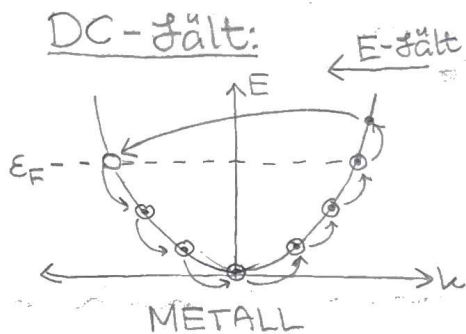
Matriselement i $\left(\frac{1}{m_{\text{eff}}} \right)$:

$$xx: \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{1}{m_e} \quad (\text{analogt för } yy, zz)$$

$$xy: \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} = 0 \quad (\text{analogt för } xz, yz)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{m_{\text{eff}}} \right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_e} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_e} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_e} \end{pmatrix}$$





AC-fält:

Elektromagnetiska fält beskrivs av vågelikvationen

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Dielektricitetskonstanten

$$\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0, \quad \epsilon_0 = 8,9 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$$

Brytningsindex $n = \sqrt{\epsilon_r}$.

Elektriskt fält \vec{E} ger polarisation \vec{P} .

Förskjutningsfält: $\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$, $\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$, $1 + \chi_e = \epsilon_r$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{ext} + \rho_{int}}{\epsilon_0} \Rightarrow \nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext}$$

$$\Rightarrow \left[\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}, t) = \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} + \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right]$$

← pga extern ström

Modell för EM-strålning \vec{E} i material:

Fjäder + dämpning i punkt \vec{r} :

$$m \frac{d^2 \vec{\xi}(\vec{r}, t)}{dt^2} = -C \vec{\xi}(\vec{r}, t) - m \eta \frac{d \vec{\xi}(\vec{r}, t)}{dt} - e \vec{E}(\vec{r}, t)$$

↑ fjäderkonst. ↑ dämpningskoeff.

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0(\vec{r}) e^{-i\omega t}$$

Lösningar ($t \gg 0$):

$$\underline{1D}: \xi(\vec{r}, t) = \xi_0(\vec{r}) e^{-i\omega t}, \quad \xi_0(\vec{r}) = \frac{e E_0(\vec{r})}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\eta\omega}$$

Polarisation:

$$P = P_0(\vec{r}) e^{-i\omega t} = n p = -e \xi(\vec{r}, t) n, \quad P_0 = \epsilon_0 \chi_e E_0$$

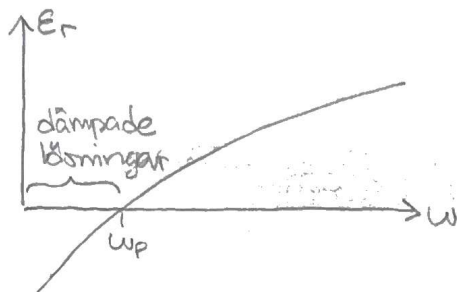
← elektrontäthet

$$\left[\epsilon_r = 1 + \chi_e = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E} = 1 - \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\eta\omega} \right]$$

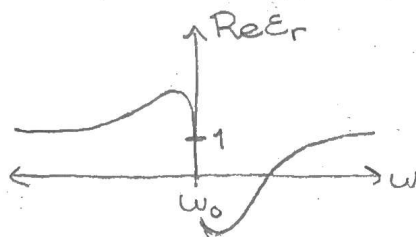
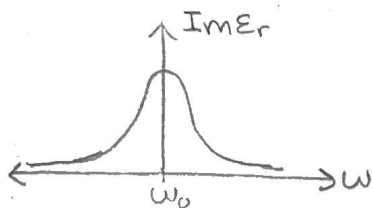
Specialfall:

Bindningselektroner $\eta \approx 0$, $\omega_0 \approx 0$:

$$\epsilon_r = 1 - \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_0 m}} \text{ plasmonfrekvensen}$$



Generellt:



Tight-binding-modell:

Isolerad atom:

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

Energiväntevärde:

$$E_n = \int \Phi_n^*(\vec{r}) \hat{H}_{\text{atom}} \Phi_n(\vec{r}) d\vec{r}, \quad n \text{ orbitaler } 1s, 2s, 2p, \dots$$

Atomer i gitter:

$$\hat{H}_{\text{solid}} = \hat{H}_{\text{atom}} + \underbrace{\sum_{\vec{R}_{\text{gitter}} \neq 0} V_{\text{atom}}(\vec{r} - \vec{R})}_{V(\vec{r})}$$

Väntevärde:

$$\int \Phi_n^*(\vec{r}) \hat{H}_{\text{solid}} \Phi_n(\vec{r}) d\vec{r} = E_n + \underbrace{\int \Phi_n^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \Phi_n(\vec{r}) d\vec{r}}_{-\beta_n \text{ (liten)}}$$

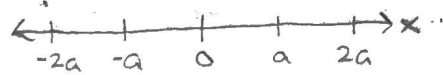
Vågfunktion:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} C_{\vec{k}, \vec{R}} \Phi_n(\vec{r}, \vec{R}) \quad (\text{normerad})$$

Vågfunktionerna uppfyller Blochs teorem.

Väntevärde:

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= \int \Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H}_{\text{solid}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} = \dots = \\ &= E_n - \beta_n + \sum_{\vec{R} \neq 0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \underbrace{\int \phi_n^*(\vec{r}) v(\vec{r}) \phi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}}_{-\gamma_n(\vec{R})} \end{aligned}$$

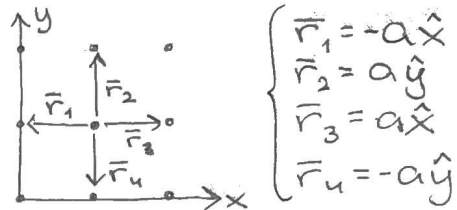
Tight-binding-modell: (forts.)1D: s-orbitalen symmetrisk.

Antag att endast närmsta atomernas potential påverkar:

$$\begin{aligned} \chi_s &= \chi(-a) = \chi(a) \quad (\text{övriga } \chi=0) \\ \Rightarrow [E(k) &= E_s - \beta_s - \sum_{R=a,-a} e^{ikR} \chi(R) = E_s - \beta_s - \chi_s (e^{-ika} + e^{ika}) = \\ &= E_s - \beta_s - 2\chi_s \cos ka] \end{aligned}$$

2D: Antag att endast närmsta grannar påverkar:

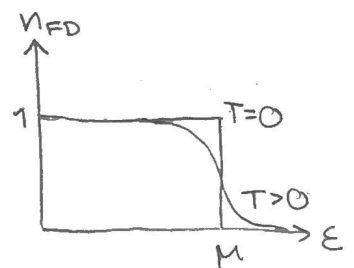
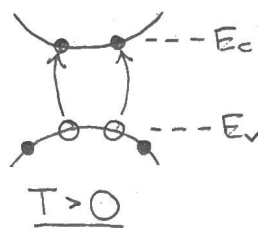
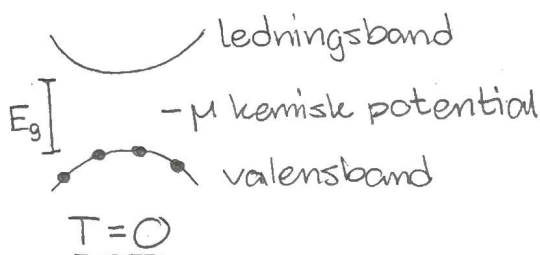
$$\chi_s = \chi(-a\hat{x}) = \chi(a\hat{y}) = \chi(a\hat{x}) = \chi(-a\hat{y})$$



$$\begin{aligned} [E(\vec{k}) &= E_n - \beta_n - \chi_n (e^{-iak_x} + e^{iak_y} + e^{iak_x} + e^{-iak_y}) = \\ &= E_n - \beta_n - 2\chi_n (\cos k_x a + \cos k_y a)] \end{aligned}$$

För små k : ($\cos ka \approx 1 - \frac{1}{2}(ka)^2$)

$$[E(\vec{k}) = E_n - \beta_n - 4\chi_n + \chi_n \underbrace{(k_x^2 a^2 + k_y^2 a^2)}_{=k^2 a^2}]$$

Halvledare:Ledningsband: $[E_{\text{cond}, \vec{k}} = E_c + ak^2]$, $a > 0$ $[a] = eV \text{Å}^2$ Valensband: $[E_{\text{val}, \vec{k}} = E_v - bk^2]$, $b > 0$.

$$E_g = E_c - E_v$$

Elektronens effektivmassa:

$$\text{Ledningsbandet: } \frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} E_{\text{cond}}(k) = \frac{1}{\hbar^2} 2a \quad (>0)$$

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

Hål:

Valensbandet:

Innan excitation:



Total energi: E_0

Total laddning: 0

Efter excitation:



$E_0 + bk^2 (> E_0)$

+e

Hål - orsaknad av elektron.

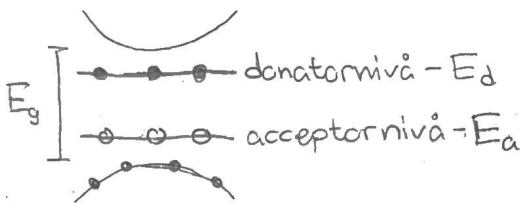
Effektivmassa av hål:

$$\frac{1}{m_h^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} (E_0 + bk^2) = \frac{2b}{\hbar^2} (> 0)$$

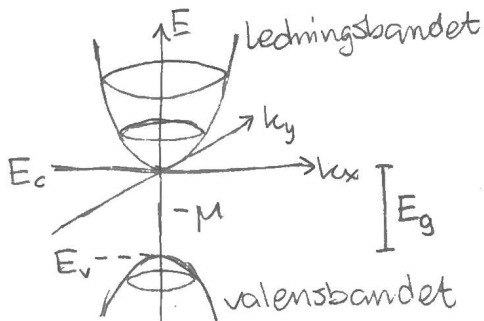
Intrinsisk halvledare (dopad):

Odopad: $\overset{\text{elektron\ddot{a}tthet}}{n} = \overset{\text{h\ddot{a}lt\ddot{a}tthet}}{p}$ (intrinsisk)

Dopad: $n \neq p$ (extrinsisk)



2D:



Antag $E_c - \mu \gg k_B T$, $\mu - E_v \gg k_B T$.

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

$$D(\epsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon - E_c}$$

$$\Rightarrow [n(T, \mu) = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} D(\epsilon) n_{FD}(\epsilon) d\epsilon = \left\{ e^{-(\epsilon - \mu)/k_B T} = e^{-(E_c - \mu)/k_B T} e^{-(\epsilon - E_c)/k_B T} \right\} =$$

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

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

N_e

$$\left(\begin{array}{l} \text{Halvledare: } n \approx 10^{16} - 10^{21} \text{ m}^{-3} \\ \text{Metall: } n \approx 10^{29} \text{ m}^{-3} \end{array} \right)$$

För hål:

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

Massverkanens lag:

$$[n(T, \mu)p(T, \mu) = N_e N_h e^{-(E_c - \mu)/k_B T} e^{-(\mu - E_v)/k_B T} = N_e N_h e^{-\overbrace{(E_c - E_v)}^{E_g}/k_B T} = N_e N_h e^{-E_g/k_B T}]$$

Specialfall oöppnad:

$$n = p = n_i$$

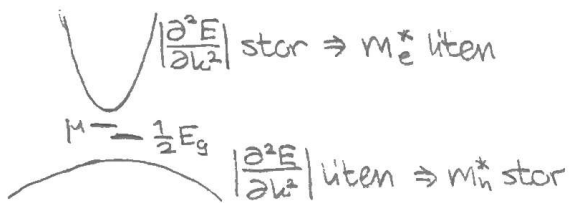
$$[n_i = \sqrt{np} = \sqrt{N_e N_h} e^{-E_g/2k_B T}]$$

Halvledare:Odopad/intrinsisk:

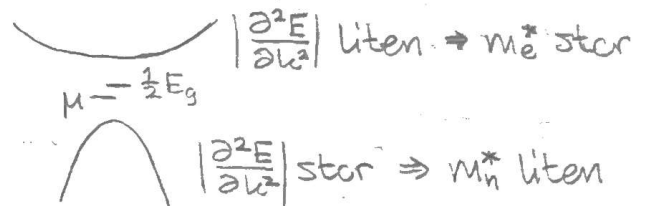
$$n=p \Rightarrow N_c e^{-(E_c - \mu)/k_B T} = N_v e^{-(\mu - E_v)/k_B T} \Rightarrow \frac{N_v}{N_c} = e^{-(E_c + E_v + 2\mu)/k_B T} \Rightarrow$$

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

$$\Rightarrow \left[\mu(T) = E_v + \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_n^*}{m_e^*}\right) \right]$$

Fall 1:

$$\Rightarrow \ln\left(\frac{m_n^*}{m_e^*}\right) > 0$$

Fall 2:

$$\Rightarrow \ln\left(\frac{m_n^*}{m_e^*}\right) < 0$$

Ex. värden:

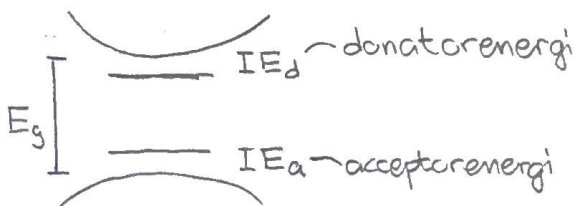
- Si (odopad): $E_g = 1,11 \text{ eV}$, $n(150 \text{ K}) = 4 \cdot 10^6 \text{ m}^{-3}$, $n(300 \text{ K}) = 1,5 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3}$
- Metaller: $n \sim 10^{28} \text{ m}^{-3}$

Väteatom:

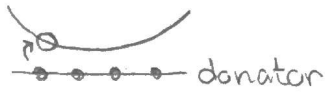
$$E_{\text{väte}} = -\frac{m_e}{32\pi^2 \hbar^2} \frac{e^4}{\epsilon_0^2} = -1 R_y = -13,6 \text{ eV}$$

$$E_{\text{dopad}} = -\frac{e^4}{32\pi^2 \hbar^2} \frac{m_e^*}{\epsilon^2} \quad (\epsilon_r \sim 5-15)$$

$$(\text{Ex. } \epsilon_r = 10, m_e^* = 0,1 m_e \Rightarrow E_{\text{dopad}} = 10^{-3} E_{\text{väte}})$$



Donator:



↙ antal joniserade donatoratomer

$$n = n_d^+ + p$$



Acceptor:



↙ antal joniserade acceptoratomer

$$p = n_a^- + n$$



Totalt: $[n + n_a^- = p + n_d^+]$

Hög T:

$$n \gg n_d^+ = n_d$$

(intrinsisk)

Mellan T:

$$n = n_d^+ + p \approx n_d$$

(extrinsisk)

Låg T:

$$n = n_d^+ \ll n_d$$

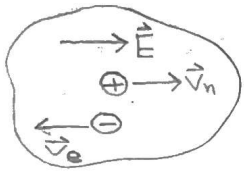
(freeze-out)

$$\Delta n = n - p, \quad n = \frac{1}{2} (\Delta n + \sqrt{(\Delta n)^2 - 4n_i^2})$$

$$\frac{\Delta n}{n_i} = 2 \sinh\left(\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}\right)$$

Konduktivitet:

(vill ha jämn ström utan acc.)



$$m_e^* \frac{d\vec{v}_e}{dt} \stackrel{NI}{=} -m_e^* \frac{\vec{v}_e}{\tau_e} - e\vec{E} \Rightarrow \left\{ \left\langle \frac{d\vec{v}_e}{dt} \right\rangle = 0 \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 0 = -m_e^* \frac{\langle \vec{v}_e \rangle}{\tau_e} - e\vec{E} \Rightarrow \langle \vec{v}_e \rangle = -\frac{e\tau_e}{m_e^*} \vec{E}$$

Strömtätheten: $\vec{j}_e = -en\langle \vec{v}_e \rangle = \frac{e^2 n \tau_e}{m_e^*} \vec{E} = \sigma_e \vec{E}$.

Analogt för hål:

$$\langle \vec{v}_h \rangle = \frac{e\tau_h}{m_h^*} \vec{E} \Rightarrow \vec{j}_h = ep\langle \vec{v}_h \rangle = \frac{e^2 p \tau_h}{m_h^*} \vec{E} = \sigma_h \vec{E}$$

Total konduktivitet:

$$\left[\sigma = \sigma_e + \sigma_h = \left\{ \text{mobilitet } \mu_{e,h} = \frac{e\tau_{e,h}}{m_{e,h}^*} \right\} = ne\mu_e + pe\mu_h \right]$$

$$\sigma_e \propto n(T) \sim \begin{cases} e^{-E_g/2k_B T} & (\text{odopat}) \\ e^{-E_d/k_B T} & (\text{dopat}) \end{cases}$$

$$\sigma_h \propto p(T) \sim -||-$$

$$\Rightarrow \ln \sigma_e = A - \frac{E_g}{2k_B T} \quad \leftarrow E_d (\text{dopat})$$

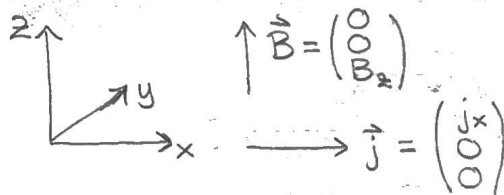
↑ konst.

Resistivitet: $[\rho = \frac{1}{\sigma}]$

Hall-effekten:

Rörelse i magnetfält:

$$\begin{cases} F_L = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{v}_q \rangle = 0 \quad (\text{ingen acc.}) \end{cases}$$



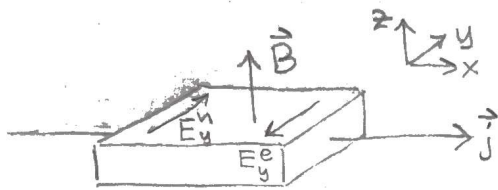
$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix}$$

$$\vec{j} = \begin{pmatrix} j_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{y}: 0 = qE_y = qv_x B_z - m_q^* \frac{v_y}{\tau_q} \Rightarrow v_y = \frac{q\tau_q}{m_q^*} (E_y - v_x B_z)$$

↑ NI utan acc.

$$= \frac{q}{e} \mu_q (E_y - v_x B_z)$$



$$j_y = 0 = q n_q v_y^q \Rightarrow$$

$$\Rightarrow v_y^q = \frac{q}{e} \mu_q (E_y - v_x B_z) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow [E_y = v_x B_z = \frac{j_x}{q n_q} B_z.]$$

Hallkoefficienten:

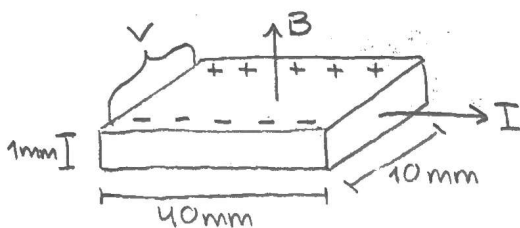
$$R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = \frac{1}{q n_q} = \begin{cases} -\frac{1}{en} & \text{(elektroner)} \\ \frac{1}{ep} & \text{(hål)} \end{cases}$$

$$R_H = \frac{1}{e} \frac{p \mu_n^2 - n \mu_e^2}{p \mu_n + n \mu_e}$$

Tentauppgifter:

5) Dopad halvledare läggs i magnetfält $B=0,3T$ och ström $I=10mA$. Halvledaren domineras av antingen elektroner eller hål. Magnetfält och ström ger upphov till spänning $V=5mV$.

- Bestäm R_H och om laddningarna är elektroner eller hål.
- Beräkna laddningsbärarens täthet (typiskt värde?).
- Spänning $U=100mV$ uppstår i strömmens riktning. Bestäm p .
- Bestäm μ av laddningsbärarna.



$$a) R_H = \frac{E_y}{j_x B_z} = \left\{ E_y = -\frac{V}{w}, j_x = \frac{I}{hw} \right\} = -\frac{Vh}{IB} = \dots = \underline{\underline{-1,7 \cdot 10^{-3} \frac{m^3}{C}}}$$

$R_H < 0 \Rightarrow$ elektroner dominerar.

$$b) R_H = -\frac{1}{en} \Rightarrow n = -\frac{1}{R_H e} = \dots = \underline{\underline{3,8 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}}}$$

Hög dopning $\sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$, intrinsisk $\sim 10^{16} \text{ m}^{-3}$ (halvledare)

\Rightarrow Rimligt värde!

$$c) \rho = \frac{1}{\sigma_e} = \left\{ j_x = \sigma_e E_x = \sigma_e \frac{U}{l}, \quad j_x = \frac{I}{hw} \right\} = \frac{Uhw}{lI} = \dots = \underline{\underline{2,5 \cdot 10^{-3} \Omega \text{ m}}}$$

\downarrow 10mm
 \uparrow 40mm

$$d) \mu = -\frac{R_H}{\rho} = \dots = \underline{\underline{0,68 \text{ m}^2/\text{Vs}}}$$