

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning, måndag 19 januari 2004

## Kristallstruktur

Kristaller har en ordnad struktur, väldefinierade ytor och vinklar och byggstenar med bestämd geometri. Historiskt har endast transparenta material klassats som kristaller.

Def (till 1996): Fast kropp där atomernas position beskrivs av ett punktgitter + en bas av atomer identiskt ordnade till varje punkt.

Gittret är ett translationsgitter.  $\mathbf{R}_{m,n,p} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + p\mathbf{a}_3$  (undantag kvasikristaller).

Def (1996): Fast kropp som ger ett väldefinierat diffraktionsmönster.

Kristaller bildas av de flesta ämnen alltifrån grundämnen till DNA-molekyler. (Detta används bl a för att bestämma DNA-molekylers struktur.)

Kristallit = liten kristall (korn). Mellan finns korngränser med mindre god ordning (kornstorlek beror på tillverkningsprocessen).

Enkristaller - hela provet är ett enda kron. (Används för att producera kiselplattor med hög renhet för halvledarindustrin.)

### Exempel $\text{Cs}^+\text{Cl}^-$

Mönsterbit = enhetscell (här en kub). I varje hörn sitter en Cs-atom och i mitten av kuben sitter en Cl-atom. Hörnatomerna delas av åtta kuber. Åtta hörn medför att  $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$  Cl-atom tillhör basen.

Gitter: enkelt kubiskt (simple cubic, sc)

Bas: Ena jonslaget i (0,0,0); andra jonslaget i  $\frac{a}{2}(1,1,1)$ .

### Exempel 2

Vad väntar vi oss för struktur på ett grundämne med "runda" atomer som packar sig tätt? Exempel på sådana atomer är ädelgasatomer, alkaliatomer, ädelmetallatomer. Si, Ge däremot vill ha sina grannar i bestämda riktningar. Strukturen byggs upp lagervis. Lager

1. Lägg en atom i position A och fyll på med andra atomer så tätt som möjligt. Triangulärt mönster bildas.
2. Ett likadant lager, men det läggs i position B så att det sjunker ned i det första lagret.
3. Detta lager kan placeras i position A eller en tredje position C på samma sätt som lager 2.

Vi kan göra olika sekvenser:

- ABABAB... Ger sk hexagonalt tätpackad struktur (hexagonal close packed, hcp)
- ABCABC... Ger ytcentrerad kubisk struktur (face centered cubic, fcc)

### Ytcentrerad kubisk struktur (fcc)

Vi bygger upp vår tätpackade struktur med sekvensen ABCABC... och får fcc. Vrider man denna fås en kub med sidan  $a$ , med en atom i varje hörn, samt en atom mitt på varje sida.

Koordinationsstal = antal närmaste grannar = 12.

Packningstäthet =  $\frac{\text{atomvolym}}{\text{cellvolym}}$ .

Kuben innehåller 8 hörnatomer som delas av 8 celler var, samt 6 sidoatomer som delas av 2 celler var. Vi får  $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$  atomer per enhetscell. Packningstätheten blir  $\frac{4 \cdot \frac{4\pi}{3} R^3}{a^3} = \frac{16\pi}{3} \left(\frac{R}{a}\right)^3 \approx 0,74$ .

### Rymdcentrerad kubisk struktur (body centered cubic, bcc)

Denna struktur är inte lika tät som fcc. Exempel på grundämnen som packas på detta sätt är Mo, W, Fe.

Koordinationsstal = 8.

Packningsgrad =  $\frac{2 \cdot \frac{4\pi}{3} R^3}{a^3} = \left\{ R = \frac{\sqrt{3}}{4} a \right\} = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{4}\right)^3 \approx 0,68$ .

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning, tisdag 20 januari 2004

## Bcc eller fcc?

### Exempel Fe

Fe är bcc för  $T < 910$  °C,  $T > 1390$  °C, men fcc för  $910$  °C  $< T < 1390$  °C. Bindningsenergi har en typisk energi på 5 eV per atom ( $k_B T = 1$  eV  $\leftrightarrow T = 11600$  K), medan skillnaden i bindningsenergi motsvarar en temperatur på omkring 1000 K. En skillnad mellan bcc och fcc är antal *näst* närmaste grannar.

### Exempel Li

Li är bcc vid rumstemperatur och vill omvandla sig till tätpackad struktur vid 75 K. Vid denna temperatur går omvandlingen långsamt, så provet blir en blandning av bcc och tätpackad struktur.

## Fcc och bcc beskrivna som sc

Basen för bcc utgörs av en atom i (0,0,0) och en andra atom i  $\frac{a}{2}(1,1,1)$ . Basen för fcc utgörs av en (hörn-)atom i (0,0,0), en andra (sido-)atom i  $\frac{a}{2}(1,1,0)$ , en tredje (sido-)atom i  $\frac{a}{2}(1,0,1)$ , samt en fjärde (sido-)atom i  $\frac{a}{2}(0,1,1)$ .

## Hur många gitter finns det?

Auguste Bravais kom med hjälp av symmetrioperationer (vridning [ $\frac{360^\circ}{n}$ ,  $n = 1, 2, 3, 4, 6$ , ej 5], spegling och inversion) fram till att endast 14 olika gitter finns - tre kubiska, två tetragonala, fyra ortorombiska, samt fem snedvinkliga, varav ett är det hexagonala.

### Exempel Kubiska strukturer: fcc

Primitiv cell = minsta möjliga enhetscell (ej unik). En primitiv cell per gitterpunkt.

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

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0)$$

Primitiva cellens volym är

$$\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \dots = \frac{a^3}{4} = \frac{\text{kubens volym}}{4}$$

### Exempel Olika primitiva celler

Ett tvådimensionellt kvadratisk rutnät har två olika primitiva enhetsceller:

- $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$   
 $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$
- $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$   
 $\mathbf{a}_2 = a(1, 1)$

Båda dessa har samma area  $= a^2$ .

## Hexagonalt gitter

Exempel Hcp-struktur (Be, Mg, Zn, Co, Cd, ...)

Strukturen gick igenom på föreläsning den 19 januari och jag refererar till den. Låt  $\mathbf{a}_1$  och  $\mathbf{a}_2$  ligga i lager ett, och låt  $\mathbf{a}_3$  vara den vektor som går från en atom i lager 1 (position A) till atomen som ligger rakt över denna i lager tre (position A). Då utgörs basen av en atom i  $(0,0,0)$  och en i  $\frac{1}{2}\mathbf{a}_3 + \frac{2}{3}(\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2)$ . För tätpackade bollar är förhållandet

$$\frac{|\mathbf{a}_3|}{|\mathbf{a}_1|} = \frac{c}{a} = 1,633.$$

För några grundämnen:

$$\begin{aligned} \text{Be: } \frac{c}{a} &= 1,56 \\ \text{Mg: } \frac{c}{a} &= 1,62 \\ \text{Zn: } \frac{c}{a} &= 1,83 \end{aligned}$$

## Andra vanliga strukturer

NaCl-kristaller byggs upp av ett fcc-gitter med en bas: en (Na) i  $(0,0,0)$  och en (Cl) i  $\frac{a}{2}(1,0,0)$ . Diamant, GaAs, ZnS, med andra har fcc-struktur med basen: en i  $(0,0,0)$  och en i  $\frac{a}{4}(1,1,1)$ . Packningstätheten är 0,34 vilket är lågt.

## Millerindex

Taltrippel för att ange ett plan. Procedur:

1. Bestäm skärningarna med axlarna (heltal, börja med  $x$ -koordinaten). Ex 2, 4, 3.
2. Invertera. Ex  $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}$ .
3. Multiplicera med minsta talet som ger heltal. Ex 12: 6, 3, 4.
4. Beteckna planet (linjen i 2D) (hkl). Ex (634).  
Minustecken sätts över siffran. Ex  $(\bar{3}1\bar{4})$

Detta verkar kanske omständigt, men avstånen mellan planen kan lätt räknas ut. För kubiska gitter är avståndet

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

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning, torsdag 22 januari 2004

## 2.2 Diffraktionsvillkor

En plan våg infaller mot en fast kropp i riktning  $\mathbf{k}$ . Vi vill beräkna intensiteten av den spridda vågen i riktning  $\mathbf{k}'$ . Antag elastisk spridning ( $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ ) samt enkelspridning, d v s atomerna är så pass svaga spridare att man kan bortse från bidraget p g a att den spridda vågen sprids av andra atomer. (Det senare antagandet är ok för röntgen och neutroner, men *ej* för elektroner.)

Låt  $\mathbf{r}_p$  vara Ortsvektorn mellan två närliggande atomer,  $\alpha$  vinkeln mellan  $\mathbf{r}_p$  och  $\mathbf{k}$ ,  $\beta$  vinkeln mellan  $\mathbf{r}_p$  och  $\mathbf{k}'$ . Då är vägskillnaden för strålarna som bryts i vardera atomen

$$\begin{aligned}\Delta_{12} &= |\mathbf{r}_p| \underbrace{\cos \alpha}_{=r_p \cdot \hat{k}} - |\mathbf{r}_p| \underbrace{\cos \beta}_{=r_p \cdot \hat{k}'} \\ &= \frac{\mathbf{r}_p \cdot \mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} - \frac{\mathbf{r}_p \cdot \mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} = \{|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|\} \\ &= \underbrace{\frac{1}{|\mathbf{k}|}}_{=\frac{\lambda}{2\pi}} \mathbf{r}_p \cdot \underbrace{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}_{=-\Delta\mathbf{k}} = -\frac{\lambda}{2\pi} \mathbf{r}_p \cdot \Delta\mathbf{k}\end{aligned}$$

Spridningsamplituden i riktning  $\mathbf{k}'$  fås som en summa över alla atomer,  $p$ , i kristallen:

$$\mathcal{A} \propto \sum_p f_p e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_p}$$

Atomens Ortsvektor,  $\mathbf{r}_p$ , kan delas upp i två delar,  $\mathbf{r}_p = \underbrace{\mathbf{r}_{mnl}}_{\text{gitter}} + \underbrace{\mathbf{r}_j}_{\text{bas}}$ , där den förra

är Ortsvektorn till gitterpunkten och den andra är vektorn från gitterpunkten till den specifika atomen i basen. På så sätt fås

$$\mathcal{A} \propto \underbrace{\left( \sum_j f_j e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \right)}_{=S, \text{ basens struktur faktor}} \underbrace{\left( \sum_{m,n,l} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{mnl}} \right)}_{=GS, \text{ gittersumma}}$$

Intensiteten är skild från noll endast då  $S \neq 0$  och  $GS \neq 0$ . Vi diskuterar först  $GS$ .  $\mathbf{r}_{mnl}$  kan delas upp i de primitiva translationsvektorerna för gittret så att  $\mathbf{r}_{mnl} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + l\mathbf{c}$ .

$$\begin{aligned}GS &= \sum_{m,n,l} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{mnl}} \\ &= \underbrace{\left( \sum_m e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot m\mathbf{a}} \right)}_{=GS_A} \left( \sum_n e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot n\mathbf{b}} \right) \left( \sum_l e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot l\mathbf{c}} \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
GS_A &= \sum (e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}})^m = \frac{1-(e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}})^N}{1-e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}} \\
&= \frac{e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}\frac{N}{2}}}{e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}/2}} \cdot \frac{e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}\frac{N}{2}}-e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}\frac{N}{2}}}{e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}/2}-e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}/2}} = \frac{\sin \frac{\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}N}{2}}{\sin \frac{\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}} \\
|GS_A|^2 &= \frac{\sin^2 \frac{\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}N}{2}}{\sin^2 \frac{\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2}}
\end{aligned}$$

Denna funktion har rejäla maxima då  $\frac{\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}{2} = \pi h$ ,  $h \in \mathbb{Z}$ , annars  $\approx 0$  om  $N$  är stort. *von Laues diffraktionsvillkor* ger villkoren för intensitetsmax:

$$\begin{cases} \Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a} &= 2\pi h \\ \Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{b} &= 2\pi k \\ \Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{c} &= 2\pi l \end{cases}$$

De  $\Delta\mathbf{k}$  som uppfyller villkoren betecknar vi  $\mathbf{G}_{hkl}$ .

**Exempel** Simple cubic (sc)

Translationsvektorena för sc-gitter är

$$\begin{cases} \mathbf{a} &= a(1, 0, 0) \\ \mathbf{b} &= a(0, 1, 0) \\ \mathbf{c} &= a(0, 0, 1) \end{cases}$$

Vi får då

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

Dessa vektorer bildar ett gitter (i detta fallet sc med sidan  $\frac{2\pi}{a}$ ) som kallas det reciproka (ihophörande) gittret eller gittret i det reciproka rummet, vågvektorummet eller  $\mathbf{k}$ -rummet.

För varje rumsgitter kan vi via von Laues diffraktionsvillkor definiera ett reciprokt gitter.

**Exempel** Bcc i rummet

Bcc kan ses som två i varandra instuckna sc, där vektron mellan är  $\frac{a}{2}(1, 1, 1)$ , så att

$$\begin{aligned}
GS_{bcc} &= GS_{sc} + GS_{sc}e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\frac{a}{2}(1,1,1)} \\
&= GS_{sc} \underbrace{\left[1 + e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\frac{a}{2}(1,1,1)}\right]}_{=P}
\end{aligned}$$

Sedan tidigare har vi att  $GS_{sc} \neq 0 \Leftrightarrow \Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$ .

$$\begin{aligned}
P &= 1 + e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\frac{a}{2}(1,1,1)} = 1 + e^{-i\pi(h+k+l)} \\
&= \begin{cases} 2 & \text{om } h+k+l \text{ jämnt} \\ 0 & \text{om } h+k+l \text{ udda} \end{cases}
\end{aligned}$$

Vi får alltså intensitetsmax för  $\mathbf{G}_{bcc} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$ ,  $h, k, l \in \mathbb{Z}$ ,  $h+k+l$  jämnt. Det gitter som detta beskriver är ett fcc-gitter med gitterparametern  $\frac{4\pi}{a}$ . (Rita upp för att inse detta!)

**Exempel** Fcc i rummet

Fcc kan ses som fyra i varandra instuckna sc. För detta gitter fås intensitetsmax för

$$\mathbf{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l), \quad h, k, l \text{ alla jämna eller udda.}$$

Detta definierar ett bcc med gitterparametern  $\frac{4\pi}{a}$ .

**Allmänt** Mot ett rumsgitter spänt av  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  svarar ett reciprokt gitter  $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$ , där  $\mathbf{A} = \frac{2\pi}{V}\mathbf{b}\times\mathbf{c}$ ;  $\mathbf{B} = \frac{2\pi}{V}\mathbf{c}\times\mathbf{a}$ ;  $\mathbf{C} = \frac{2\pi}{V}\mathbf{a}\times\mathbf{b}$ ;  $V = |\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})|$  (Kittel 2.13).

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 4, måndag 26 januari 2004

## (fortsättning från föreläsning 3)

Diffraktionsvillkoret kan således skrivas

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}_{hkl}, \quad |\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$$

Låt vinkeln mellan  $\mathbf{k}'$  och  $\mathbf{k}$  vara  $2\theta$ .  $\theta$  kallas braggvinkeln.

$$|\mathbf{k}| \sin \theta = \frac{1}{2} G_{hkl}, \quad (G_{hkl} = |\mathbf{G}_{hkl}|)$$

$$\Leftrightarrow 2 |\mathbf{k}| \sin \theta = G_{hkl} \quad (1)$$

Ovanstående är i  $\mathbf{k}$ -rummet. Om vi vill övergå till rummets parametrar kan vi utnyttja

- $G_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$ ,  $d_{hkl}$  är planavståndet för  $(hkl)$ -planet
- $\mathbf{G}_{hkl} \perp (hkl)$

och får med (1) *Braggs lag*

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

## 2.3 Braggs lag som Bragg härledde den

Strålning med våglängden  $\lambda$  infaller mot atomplan med planavstånd  $d$ . Strålen bildar vinkeln  $\theta$  med planen. Strålen delar upp sig i två strålar, A och B, vilka reflekteras i det översta respektive det näst översta atomplanet. Vägskillnaden blir

$$\begin{aligned} & \frac{d}{\sin \theta} - \frac{d}{\sin \theta} \underbrace{\cos 2\theta}_{=1-2\sin^2 \theta} \\ &= \frac{d}{\sin \theta} 2\sin^2 \theta = 2d \sin \theta \end{aligned}$$

Konstruktiv interferens uppstår om vägskillnaden är en multipel av våglängden, d v s

$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad m \in \mathcal{Z}$$

Var finns  $m$  i den andra härledningen? Det är inbyggt i  $d_{hkl} = \{\text{kubiskt gitter}\} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ .

## 2.4 1D och 2D gitter

### 1D

von Laue:  $\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} = 2\pi h$ ,  $h \in \mathcal{Z}$ ,  $\mathbf{a} = a(1, 0, 0)$

$$\Rightarrow \Delta k_x = \frac{2\pi}{a}h$$

För varje värde på  $h$  definieras ett plan i  $k$ -rummet. Diffractionsvillkoret är uppfyllt för varje  $\Delta \mathbf{k}$  som börjar på ett av dessa plan och slutar på ett annat eller samma plan.

## 2D

$$\text{von Laue: } \begin{cases} \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} = 2\pi h & , \text{ def planskara } \perp \mathbf{a}, \text{ planavstånd } \frac{2\pi}{h} \\ \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{b} = 2\pi k & , \text{ def planskara } \perp \mathbf{b}, \text{ planavstånd } \frac{2\pi}{k} \end{cases}$$

Villkoret uppfylls för en vektor  $\Delta \mathbf{k}$  mellan planskarnas skärningslinjer. Dessa kallas stavar.

### Exempel: 2D LEED (Lågenergielektrondiffraction)

Elektroner med 50 eV infaller vinkelrätt mot ytan av en Ni(100)-kristall. Antag att diffractionsmönstret erhålls mest från det översta atomlagret. Hur ser mönstret ut?

**Anm:** Ni(100) är nickelkristall skuren så att dess yta är parallell med planet med millerindex (100).

Experimentet sker under vacuum ( $\sim 10^{-10}$  torr) och mönstret tas upp på en fluorescent skärm. För att rengöra kristallytan bombarderas den med  $\text{Ar}^+$  följt av uppvärmning för att läcka ut skador orsakade av bombardemanget.

Ni är fcc med  $a = 3,52 \text{ \AA}$ . Om man tittar på två konventionella enhetsceller staplade på varandra ser man att ytan byggs upp av romber med sidan  $\frac{a}{\sqrt{2}}$ . Kristallytan är alltså ett kvadratisk gitter. I  $k$ -rummet fås då också ett kvadratisk gitter av stavar, med sidan  $\frac{2\pi}{a/\sqrt{2}}$ . Elektronernas kinetiska energi

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

Med  $E = 50 \text{ eV}$  fås  $k = 3,62 \text{ \AA}^{-1}$ . Betrakta stavarna i ett snitt från sidan.

### Evaldkonstruktion av diffraktionsstrålar:

1. Rita in  $\mathbf{k}$  så att spetsen träffar en stav
2. Slå upp en sfär (cirkel i 2D) med  $R = |\mathbf{k}|$
3. Skärningarna med stavarna ger  $\mathbf{k}'$

Avståndet mellan stavarna är  $\frac{2\pi}{a/\sqrt{2}} = 2,52 \text{ \AA}^{-1}$  varför sex möjliga  $\mathbf{k}'$  finns i snittet vi tittar på - en längs  $\mathbf{k}$ , en tvärtom, två snett uppåt åt varsitt håll samt två snett nedåt. De sneda  $\mathbf{k}'$  bildar vinkeln  $\alpha$  med stavarna, sådan att

$$\sin \alpha = \frac{\frac{2\pi}{a/\sqrt{2}}}{|\mathbf{k}|}$$

Vi får två (sfäriska) fläckar på skärmen. På samma sätt analyseras andra snitt.



# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 5, tisdag 27 januari 2004

## 2.5 Vilka $\mathbf{k}$ ger diffraktionsstrålar?

Villkor  $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}_{hkl}$ , samt  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ .  $\mathbf{G}_{hkl}$  spänner ett gitter i  $\mathbf{k}$ -rummet. I tre dimensioner fås punkter, i två dimensioner fås stavar och i en dimension fås plan som vi kommit fram till tidigare. Det är därför en liten chans att erhålla en diffrakterad stråle med slumpmässigt vald infallsriktning och våglängd (slumpmässigt valt  $\mathbf{k}$ ) i tre dimensioner.

Léon Brillouin (1889 - 1960 (?)) formulerade ett användbart villkor för diffraktion (särskilt för elektronernas energier i kristaller). von Laues och Braggs villkor ( $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_{hkl}$ ,  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ ) ger

$$|\mathbf{k}'|^2 = |\mathbf{k}|^2 + |\mathbf{G}_{hkl}|^2 + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_{hkl}$$
$$\Rightarrow \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|} = -\frac{1}{2} |\mathbf{G}_{hkl}|$$

Vi låter  $-\mathbf{G}_{hkl} \rightarrow \mathbf{G}_{hkl}$  och får

$$\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|} = \frac{1}{2} |\mathbf{G}_{hkl}|$$

Brillouins diffraktionsvillkor säger därför att  $\mathbf{k}$  skall träffa mittpunktsnormalplanet till någon reciprok gittervektor. Dessa plan kallas för *brillouinzonplan*. Den volym i  $\mathbf{k}$ -rummet som avgränsas av de närmaste brillouinzonplanen kallas första brillouinzone (BZ). (Se Kittel, fig s 13 (bcc) samt s 15 (fcc)!) Första BZ för sc är en kub med en gitterpunkt i centrum.

## 2.6 Basens strukturfaktor

Kom ihåg att kristall = translationsgitter + bas, samt att intensiteten

$$I = \left| \sum_j f_j e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \right|^2 \left| \sum_{m,n,p} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{mnp}} \right|^2$$

- Om *en* atom i basen (i gitterpunkten):  $S = f$
- Om *flera* atomer i basen *kan* strukturfaktorn  $S = 0$  fast gittersumman  $GS \neq 0$ , dvs en reflex tillåten av gittret kan slås ut p g a destruktiv interferens i basen.

**Exempel:** Diamant, Si, Ge

Gittret är fcc, basen:  $(0, 0, 0)$ ,  $\frac{a}{4}(1, 1, 1)$ , där  $a$  är kantlängden i den konventionella enhetscellen. För fcc gäller

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

där  $h, k, l$  alla är udda eller jämna. Eftersom vi har samma atomslag på båda platserna i basen fås

$$S = f \left( 1 + e^{-i\frac{2\pi}{a}(h,k,l) \cdot \frac{a}{4}(1,1,1)} \right) = f \left( 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} \right)$$

$$\therefore S = 0 \Leftrightarrow \frac{\pi}{2}(h+k+l) = \pi + m2\pi, m \in \mathcal{Z}$$

$$\Leftrightarrow h+k+l = 2 + 4m$$

För följande  $hkl$  fås fläckar (ordnade i stigande  $h^2 + k^2 + l^2$ )

<b>fcc</b>	<b>111</b>	<b>200</b>	<b>220</b>	<b>311</b>	<b>222</b>	<b>400</b>	<b>...</b>
<b>diamant</b>	<b>111</b>		<b>220</b>	<b>311</b>		<b>400</b>	<b>...</b>

Varför ordna efter stigande  $h^2 + k^2 + l^2$ ? Bragg:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \Leftrightarrow \sin \theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \{\text{kubiskt gitter}\} = \frac{\lambda\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{2a}$$

**Exempel:** GaAs, GaP

Gitter: fcc, bas: en atom (Ga) i  $(0,0,0)$  en (As) i  $\frac{a}{4}(1, 1, 1)$ .

$$f_{Ga} \neq f_{As} \Rightarrow |S| = |f_{Ga} - f_{As}| \neq 0,$$

Men exempelvis (200)-reflexen blir svagare.

## 2.7 Termisk rörelse (Appendix A)

Figur 1 på sid 631 i Kittel visar att

- diffraktionen är fortfarande väldefinierad vid  $T \neq 0$
- intensiteten avtar när  $T$  ökar

$$I(T) = I(0) \exp \left[ \underbrace{-\frac{k_B T}{M\omega^2} |\mathbf{G}_{hkl}|^2}_{D-W} \right]$$

(förenklad modell, "Einsteinmodellen", varje atom en harmonisk oscillator med  $M, \omega$ )

### Debye-Waller-faktor

Peter Debye (1884 - 1966), Ivar Waller (1898 - 1991, Sverige). Vid  $T \neq 0$  vibrerar atomerna, så att

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{mnp}(t) &= \mathbf{r}_{mnp} + \mathbf{u}(t) \\ GS &= \sum_{m,n,p} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{mnp}(t)} \\ &= \sum_{m,n,p} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{mnp}} \cdot \underbrace{e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(t)}}_{=1-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(t) + \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Serieutveckla andra termen i produkten

$$e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(t)} = 1 - i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(t) + \frac{1}{2}(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(t))^2 + \dots$$

och medelvärdesbilda

$$\begin{aligned} \overline{GS} &= \sum_{m,n,p} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{mnp}} \left( 1 - \underbrace{i\Delta\mathbf{k} \cdot \overline{\mathbf{u}(t)}}_{=0} + \frac{1}{2} \overline{(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(t))^2} + \dots \right) \\ \Delta\mathbf{k} &= \mathbf{G} \end{aligned}$$

$$\overline{(\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}(t))^2} = G^2 \overline{u^2(t)} \underbrace{\overline{\cos^2 \theta(t)}}_{=1/3}, \text{ d\u00e4r } \theta(t) \text{ \u00e4r vinkeln mellan } \mathbf{G} \text{ och } \mathbf{u}(t).$$

$$1 - 0 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} G^2 \overline{u^2(t)} + \dots = e^{-\frac{1}{6} G^2 \overline{u^2(t)}} \text{ (exakt f\u00f6r harmoniska oscillatorn)}$$

F\u00f6r harmoniska oscillatorn g\u00e4ller f\u00f6r potentiella energin

$$\overline{U} = \frac{1}{2} C \overline{u^2} = \frac{3}{2} k_B T, \text{ } C \text{ kraftkonstant s a } \omega = \sqrt{\frac{C}{M}}$$

$$\Rightarrow \overline{u^2} = \frac{3k_B T}{M\omega^2}$$

$$\Rightarrow GS = GS(T=0) \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{k_B T}{M\omega^2} G^2\right]$$

$$\Rightarrow I(T) = I(0) \cdot \exp\left[-\frac{k_B T}{M\omega^2} G^2\right]$$

## 2.8 Ny definition av begreppet kristall

**Tidigare:** kristall = translationsgitter + bas.

**Nu (1996):** Substans som ger ett distinkt diffraktionsm\u00f6nster.

D. Schechtman skapade i-AlMn (legering som snabbkyls fr\u00e5n en sm\u00e4lta, i st\u00e5r f\u00f6r icosaeder). Mn-atomen \u00e4r omgiven av 12 st Al-atomer i h\u00f6rnen p\u00e5 en icosaeder. Substansen gav ett distinkt diffraktionsm\u00f6nster, men icosaedern ger inget translationsgitter.

2D: Kakelmakarens problem: Hur t\u00e4cka en yta med s\u00e5 f\u00e5 plattformar som m\u00f6jligt utan att m\u00f6nstret upprepar sig? R Penrose gav en l\u00f6sning med tv\u00e5 plattor.

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 6, torsdag 29 januari 2004

## 3. Defekter

Indelas efter storlek

- Punktdefekter: vakanser, mellanlägesatomer (ofta små atomer, ex H i Pd, C i Fe, dopämnen i halvledare)
- Linjedefekter: dislokationer (ex halvt atomplan mellan ordinarie plan, avgörande för hållfasthetsegenskaper)
- Ytdefekter: kristallytan (atomerna kan ha annan ordning), korngränser

### 3.1 Vakanser

En atom som flyttas från det inre av materialet till ytan ger en så kallad Schotky-defekt (kuriosa: Schotky - the Moses of Silicon Valley), medan en atom som flyttas från det inre till ett mellanläge ger en Frenkeldefekt. Vakansbildningsenergin,  $E_v$  = bindningsenergi i det inre - bindningsenergi på ytan.  $E_v > 0$  eftersom det finns fler atomer att binda till i det inre. Typiskt  $E_v \sim 1$  eV. Förekomst och antal (halt) är begripligt m h a termodynamik.

$$F = U - TS,$$

där  $U$  är inre energin,  $S$  entropin. Det kostar energi att bilda vakans, men entropin ökar samtidigt.

$$\begin{aligned}\Delta F &= \Delta U - T\Delta S \\ &= nE_v - Tk_B \ln \frac{N!}{n!(N-n)!},\end{aligned}$$

där antal vakanser  $n \ll N$ , antal atomer. Samtidigt är  $N \gg 1$ ,  $n \gg 1$ ,  $N-n \gg 1$ .

Stirlings formel

$$\ln(N!) \approx N \ln N - N$$

ger

$$\Delta F = nE_v - k_B T [(N \ln N - N) - (n \ln n - n) - ((N-n) \ln(N-n) - (N-n))]$$

Bestäm minimum (extremum) av funktionen  $\Delta F = \Delta F(n)$ !

$$0 = \frac{d\Delta F(n)}{dn} = E_v - k_B T \left[ -\ln n - 1 + \ln(N-n) - (N-n) \frac{-1}{N-n} \right]$$

$$= E_v - k_B T \ln \frac{N-n}{n}$$

$$\Rightarrow \frac{N-n}{n} = e^{\frac{E_v}{k_B T}}$$

$$\underbrace{\frac{N-n}{n}}_{\approx \frac{N}{n}}$$

$$\Rightarrow \frac{n}{N} = e^{-\frac{E_v}{k_B T}}$$

## Exempel

$$E_v = 1 \text{ eV}, k_B T_{\text{rumstemp}} = 25 \text{ meV}$$

$$\frac{n}{N} = e^{-\frac{1}{0,025}} = e^{-40} \approx 10^{-16}$$

$$T = 1200 \text{ K}$$

$$\Rightarrow k_B T = 100 \text{ meV}$$

$$\Rightarrow \frac{n}{N} = 10^{-4}$$

d v s *starkt* temperaturberoende.

## Man kan erhålla information om $E_v$ på olika sätt:

1.  $V = \{\text{sc}\} = Na^3$

$$\Delta V = \Delta N a^3 + n \cdot 3a^2 \Delta a$$

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\Delta N}{N} + 3 \frac{\Delta a}{a}$$

$$V = l^3 \Rightarrow \frac{\Delta V}{V} = \frac{3\Delta l}{l}$$

Sätt  $\Delta N = n$

$$\Rightarrow \frac{n}{N} = 3 \frac{\Delta l}{l} - 3 \frac{\Delta a}{a}$$

Mät längdutvecklingen ( $\frac{\Delta l}{l}$ ) med laserinterferens och gitterparametern ( $\frac{\Delta a}{a}$ ) med röntgenstrålning vid olika temperaturer.  $\ln \frac{n}{N}$  plottas som funktion av  $\frac{1}{T}$  vilket ger en rät linje med lutning  $\frac{E_v}{k_B}$ .

2. Billigare metod

(a) Håll en tråd vid hög temperatur,  $T_h$

(b) Släpp ned tråden i exempelvis flytande kväve (77 K). Atomerna hinner inte ordna om sig.

(c) Resistivitetsskillnaden  $\Delta\rho = \rho_s - \rho_l \propto n$  vid  $T_h$ . (Resistiviteten hos den snabbkylda tråden  $\rho_s > \rho_l$  som är resistiviteten hos en långsamt kyld tråd.)

Upprepa för olika  $T_h$ . Ledningselektronerna störs av kollision med vakanserna. Avsätt  $\Delta\rho(T_h)$  mot  $\frac{1}{T_h}$  för att få  $E_v$ .

3. Mät  $C_V$  vid höga  $T$ .

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

$$\Delta U_{\text{vakanser}} = nE_v \sim Ne^{-\frac{E_v}{k_B T}}$$

4. För exempelvis NaCl eller KCl kan vakanserna observeras optiskt. Värm saltet i närvaro av en alkalimetallång (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>)  $\Rightarrow$  Cl<sup>-</sup> dras till ytan för att förena sig med Na<sup>+</sup>. Grannjonerna ger upphov till en potentialgrop som kan hålla en elektron bunden, men lösare än övriga valenselektroner. Denna elektron kan exciteras med ljus i det synliga energiområdet. Koksalt blir vackert gult.

## 3.2 Diffusion

### Exempel: C i Fe

C i mellanlägen mellan Fe-atomer.



Den ensamma C-atomen diffunderar in genom ytan på järnet. Mellan Fe-atomerna ligger C-atomen i en potentialgrop. För att den ska "hoppa" till nästa mellanläge krävs energin  $E_D$  (aktiveringsenergi för diffusion). För C i Fe är  $E_D \sim 0,9 \text{ eV}$ .

Hoppförsöksfrekvensen  $f =$  vibrationsfrekvensen ( $\sim 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ).

Sannolikheten att atomen har en energi  $E > E_D$  är  $e^{-\frac{E_D}{k_B T}}$ .

Antal lyckade hoppförsök:  $f e^{-\frac{E_D}{k_B T}}$ .

Antal atomer i lammell vid  $x$ :  $N(x)Aa$ , där  $A$  är den betraktade arean,  $a$  är avståndet mellan Fe-atomerna,  $N(x)$  tätheten av C-atomer.

Antal hopp åt höger per sekund:  $AaN(x)fe^{-\frac{E_D}{k_B T}}$

Antal hopp åt vänster per sekund:  $AaN(x+a)fe^{-\frac{E_D}{k_B T}}$

. . .

Fortsättning följer på måndag, men resultatet vi då skall få fram är

$$I = \underbrace{[N(x) - N(x+a)]}_{=-a \frac{dN}{dx}} f e^{-\frac{E_D}{k_B T}} = - \underbrace{[a f e^{-\frac{E_D}{k_B T}}]}_{=D} \cdot \frac{dN}{dx}, \text{ } D \text{ kallas diffractionskonstanten.}$$

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 7, måndag 2 februari 2004

## 3.2 Diffusion (forts)

Exempel C i Fe (forts)

Vi hade hopp åt höger

$$N(x)Aaf e^{-E_D/k_B T}$$

och vänster

$$N(x+a)Aaf e^{-E_D/k_B T}$$

Nettopartikelström åt höger

$$I = [N(x) - N(x+a)] Aaf e^{-E_D/k_B T}$$

Taylorutveckla

$$N(x+a) \approx N(x) + a \frac{dN(x)}{dx}$$

så fås partikelström*tätheten* åt höger

$$J = \frac{I}{A} = - \underbrace{\left[ a^2 f e^{-E_D/k_B T} \right]}_{=D=D_0 e^{-E_D/k_B T}} \frac{dN(x)}{dx}$$

(Notera diffusionskonstantens starka temperaturberoende!)

Vi har således fått *Ficks lag*:

$$J = -D \frac{dN(x)}{dx}$$

**Hur ofta hoppar en atom?**

Vid rumstemperatur, både höger och vänster

$$2f e^{-E_D/k_B T} = 2 \cdot 10^{14} e^{-0,9 \text{ eV}/0,0025 \text{ eV}} \text{ s}^{-1} \approx 0,1 \text{ s}^{-1} \approx 10^{-15} \cdot f$$

Vid 1200 K:

$$2 \cdot 10^{14} e^{-0,9 \text{ eV}/0,1 \text{ eV}} \text{ s}^{-1} \approx 10^5 \text{ s}^{-1}$$

**Hur långt kommer atomen?**

Efter  $n$  hopp:

$$X_n = X_{n-1} \pm a$$

Medelvärdesbilda över många försök:

$$\overline{X_n^2} = \overline{X_{n-1}^2} + a^2 \underbrace{\overline{\pm 2aX_{n-1}}}_{=0} = \overline{X_{n-1}^2} + a^2$$

$$\Rightarrow \overline{X_n^2} = na^2$$

$$n = 2f e^{-E_D/k_B T} \cdot t$$

$$\overline{X_n^2} = na^2 = \underbrace{2a^2 f e^{-E_D/k_B T}}_{=D} t$$

$$\Rightarrow \sqrt{\overline{X_n^2}} = \sqrt{2Dt}$$

$$N(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

## Självdiffusion

### Exempel Au i Au

Sker främst genom att vakanser flyttar sig. Aktiveringsenergi  $E_A$ .

$$e^{-E_A/k_B T} = \underbrace{e^{-E_V/k_B T}}_{P_V} \cdot \underbrace{e^{-E_\mu/k_B T}}_{P_\mu},$$

där  $P_V$  är sannolikheten att atomen har en vakans till granne och  $P_\mu$  är sannolikheten att atomen då emigrerar till vakansen. Detta kan mätas med hjälp av radioaktiva isotoper.

## 3.3 Dislokationer (linjedefekt)

Avgörande för hållfastheten.

Hur mycket belastning tål en kristall utan att deformeras? Man kan tänka sig att då man drar i en kristall den glider (eller skjuvas) i ett glidplan. Glidplanet är ett tätpackat plan ((110) för bcc, (111) för fcc). Det uppstår då en skjuvspänning

$$\tau = G \frac{x}{d},$$

där  $G$  är skjuvmodulen (materialkonstant, Al:  $G = 2,5 \cdot 10^{11} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2} = 2,5 \cdot 10^{10} \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$ ) och  $\frac{x}{d}$  är skjuvvinkeln vid små förflyttningar  $x$  ( $d$  är planavståndet).

$$\tau = \tau_{max} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \approx \{x \ll a\} \approx \tau_{max} \frac{2\pi x}{a}$$

$$\Rightarrow G \frac{x}{d} = \tau_{max} \frac{2\pi x}{a}$$

Om  $a \approx d$  fås  $\tau_{max} = \frac{1}{2\pi} G \approx \frac{G}{6}$ . Detta ger, teoretiskt, för Al

$$(\tau_{max})_{\text{teoretiskt}} \approx 10^{10} \frac{\text{N}}{\text{m}^2},$$

men det experimentellt uppmätta värdet är

$$(\tau_{max})_{\text{uppmätt}} \approx 4 \cdot 10^5 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}.$$

Det skiljer en faktor  $10^4$  på värdena. Glidplan är alltså inte avgörande för hållfastheten. Anledningen är att en mindre del av kristallen rör sig.

**Analogi** Två sätt att flytta en matta

- Den starke (Emil) drar mattan längs golvet.
- Den förtänksamma (Emilia) skapar en bula på mattan och flyttar bulan tills hela mattan är flyttad. Kraften som krävs är betydligt mindre.

### Två huvudtyper av dislokationer

- Kantdislokation. Ett halvt atomplan instucket mellan två plan. Kanten för halvplanet kallas dislokationslinje och är centrum för defekten (linje).



- Skruvdislokation. Atomplanen är som planen i ett parkeringshus. Bildningsenergi  $\sim 1 \text{ eV} / \text{atomplan}$  som dislokationslinjen passerar  $\Rightarrow$  stor energi, förekomsten kan ej förklaras enkelt.

### Burgers vektor, $\mathbf{b}$

Fås genom att gå runt dislokationslinjen ( $n_x$  steg åt höger och vänster,  $n_y$  steg uppåt och nedåt) och  $\mathbf{b}$  är vektorn från startpunkten till slutpunkten. För kantdislokationer är  $\mathbf{b} \perp$  dislokationslinjen och  $E_{\text{distok}} \propto |\mathbf{b}|^2$  (jämför fjäder). För skruvdislokationer är  $\mathbf{b} \parallel$  skruvens axel.

### Hållfasthet

För att erhålla hög hållfasthet skall man hindra dislokationerna (D) att röra sig. Metoder:

1. Små korn  $\Rightarrow$  D har svårt att röra sig över korngränsen
2. Utfällningar av hårda partiklar, t ex karbider
3. Mekanisk bearbetning (smide)  $\Rightarrow$  härvor av D som låser varandra

God hållfasthet försämras vid hög temperatur

1. Korn växer
2. Utfällningar löses upp
3. Atomerna lagrar om sig och antal dislokationer minskar

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 8, tisdag 3 februari 2004

## 4. Vibrationer

1. Dispersion,  $\omega(\mathbf{k})$
2. Bidrag till  $C_V$
3. Bidrag till värmeledningsförmågan,  $\lambda$

### 4.1 Dispersion, $\omega(\mathbf{k})$

Betrakta en kedja av likadana atomer sammankopplade med fjädrar med fjäderkonstanten  $C$ . Antag att endast närliggande atomer är sammankopplade (detta är en approximation). Varje atom  $s$  kan placeras  $u_s$ . Newton ( $ma = F$ ):

$$m\ddot{u}_s = C[u_{s+1} - u_s] + C[u_{s-1} - u_s] = C[u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s]$$

Ansätt våglösning

$$u = u_0 e^{i(kx - \omega t)}, \quad x = sa \text{ för atom } s.$$

Insättning ger

$$\begin{aligned} -m\omega^2 u &= C [e^{ika} + e^{-ika} - 2] u \\ e^{ika} + e^{-ika} - 2 &= 2 \cos ka - 2 = 2(\cos ka - 1) = -4 \sin^2 \frac{ka}{2} \\ \Rightarrow m\omega^2 &= 4C \sin^2 \frac{ka}{2} \\ \Rightarrow \omega &= \sqrt{\frac{4C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \end{aligned}$$

Observationer

1. Kedjan propagerar vågor endast för  $\omega < \omega_{max}$ . För  $\omega > \omega_{max}$  måste  $\mathbf{k}$  vara komplext och en dämpad våg fås.
2.  $v_g = \frac{d\omega}{dk} = 0$  för  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ . Varför? Diffraktionsvillkoret uppfyllt:  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = \frac{1}{2}G^2$ . Här är  $G = \frac{2\pi}{a} \Rightarrow k = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{a} = \frac{\pi}{a}$ . En stående våg fås.
3. Alla möjliga svängningar beskrivs med hjälp av  $k$  i ett intervall  $\frac{2\pi}{a}$  långt (ex  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ ).

$$u_s = u_0 e^{i(ksa - \omega t)} = u_0 e^{i([k + \frac{2\pi}{a}m]sa - \omega t)} = u_0 e^{i(ksa - \omega t)} \underbrace{e^{im \cdot 2\pi s}}_{=1}$$

Ögonblicksbild,  $t = 0$

$$u_s = u_0 e^{iks a}$$

$$\Re u_s = u_0 \cos k \underbrace{sa}_{=x}$$

Exempel:  $k = \frac{\pi}{4a}$ :  $k' = k + \frac{2\pi}{a} = \frac{\pi}{4a} + \frac{2\pi}{a} = \frac{9\pi}{4a}$ ,  $k' \Delta x = 2\pi \Rightarrow \Delta x = \frac{8}{9}a$   
Både med  $k$  och  $k'$  fås i gitterpunkterna samma  $\Re u_s$ .

- Små  $k$ :  $\omega = \sqrt{\frac{4C}{m}} \sin \frac{ka}{2} \approx \sqrt{\frac{4C}{m}} \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} k \propto k$ . Jämför med ljudvågor i elastiskt medium:  
 $v_{ljud} = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \leftrightarrow \sqrt{\frac{C/a}{m/a^3}}$   
 $k \rightarrow 0 \Rightarrow \lambda \rightarrow \infty$  (långvågsgräns)
- Tre slags moder,  $u_x$  longitudinell svängning,  $u_y, u_z$  transversella svängningar.  
 $\omega_{longitudinell} > \omega_{transversell}$
- Med två olika atomer i kedjan fås en optisk gren i  $\omega - k$ -diagrammet.  
 Denna gren har maximum för  $k = 0$ ,  $\omega_{max} = \sqrt{\frac{1}{2C} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)}$ . Kan dras igång av en elektromagnetisk våg ( $k \approx 0$ ) om det är joner i cellen med olika laddning.
- Kvantmekanisk svängning med frekvens  $\omega \Rightarrow$  kvantisering av vibrationsenergin i kvanta  $\hbar\omega$ : fononer (jämför fotoner).
- Bestämning av dispersionsrelation  $\omega(\mathbf{k})$ . Spridning av neutroner (1960-talet):  
 $E_{in} = E_{ut} \pm \hbar\omega(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{k}_{ut} = \mathbf{k}_{in} \pm \mathbf{k}$  (eller  $\pm \mathbf{G}_{hkl}$ )

## 4.2 Bidrag till $C_V$

Definitionen är

$$C_V = \frac{dU}{dT}.$$

Klassisk fysik ger ( $6N$  frihetsgrader, energin  $\frac{1}{2}k_B T$  per frihetsgrad)

$$C_V = \frac{d}{dT} [6N \cdot \frac{1}{2}k_B T] = 3Nk_B T$$

Experiment visar annorlunda!

- Metaller:  $C_V = \alpha T + \beta T^3$ , där den linjära termen kommer från elektronbindning
- Isolatorer:  $C_V = \beta T^3$

Två modeller för att beskriva fononbidraget till  $C_V$ :

### Einsteinmodellen

Varje atom svänger med samma frekvens,  $\omega_E$  (parameter). (Negligerad dispersion.)  $3N$  rumsliga frihetsgrader ger

$$U = 3N\hbar\omega_E \frac{1}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1}$$

Plancks fördelningslag

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3N\hbar\omega_E \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T} \cdot \frac{\hbar\omega_E}{k_B T^2}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}$$

$$\hbar\omega_E \ll k_B T \Rightarrow C_V \approx 3Nk_B$$

$$\hbar\omega_E \gg k_B T \Rightarrow C_V \rightarrow 0, \text{ då } T \rightarrow 0$$

## Debyemodellen

Antag

$$\omega(\mathbf{k}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{k},$$

där  $\mathbf{v}$  är ljudhastigheten.

$$U = 3 \sum_k \hbar \omega_k \frac{1}{e^{\hbar \omega_k / k_B T} - 1}$$

1. Omvandla summan över  $k$  till en integral.
2. Övergå från integral över  $k$  till integral över  $\omega$ .

Hur många  $k$ -värden finns i intervallet  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$  (1D)? Periodiska randvillkor, kedjan upprepas periodiskt, kräver  $u(sa) = u(sa + L)$ .

Vi hade  $t = 0$

$$u(sa) = u_0 e^{iks a}$$

$$u(sa + L) = u_0 e^{ik(sa+L)} = u_0 e^{iks a} e^{ikL}$$

Randvillkoret kräver härmed att

$$e^{ikL} = 1$$

$$\Rightarrow kL = n \cdot 2\pi, n \in \mathcal{Z}$$

$$\Rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{L}$$

Antal moder ( $k$ -värden) i intervallet:

$$\frac{\frac{\pi}{a} - (-\frac{\pi}{a})}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{a} = N$$

(Fortsättning följer...)

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 9, torsdag 5 februari 2004

## Fortsättning, debyemodellen

$$1D: \sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk$$

$$3D: \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d\mathbf{k} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_0^{k_D} 4\pi k^2 dk = N$$

$$\Rightarrow N = \frac{L^3}{8\pi^3} 4\pi \frac{k_D^3}{3}$$

Med  $L^3 = V$  fås debyevektorn

$$k_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}},$$

debyefrekvensen

$$\omega_D = vk_D$$

och debyetemperaturen

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

$$\Rightarrow \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{3N}{k_D^3} \int_0^{k_D} k^2 dk = \int_0^{\omega_D} \underbrace{\frac{3N}{k_D^3} \frac{\omega^2}{v^2}}_{D(\omega)} d\omega$$

$D(\omega)$  är tillståndstätheten.

$$U = 3 \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3 \int_0^{\omega_D} \underbrace{D(\omega)}_{\propto \omega^2} d\omega \frac{\hbar\omega e^{\hbar\omega/k_B T} \cdot \frac{\hbar\omega}{k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2}$$

Sätt  $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow C_V &= 9Nk_B \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_D}\right)^3 \int_0^{x_D} dx x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \\ &= \left\{ \frac{\Theta_D}{T} = x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} \right\} = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} dx x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \end{aligned}$$

Om  $T \ll \Theta_D$ :  $C_V = \frac{12\pi^2}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \propto T^3$

Om  $T \gg \Theta_D$ :  $C_V \approx 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} dx x^4 \frac{1}{(1+x)^2} = 3Nk_B$

## 4.3 Värmeledning p g a fononer

I isolatorer leds värme enbart av fononer. Debye använde resultat från kinetisk gasteori för att beskriva fononbidraget till värmeledningsförmågan. Flödestätheten

$$J_U = -\lambda \frac{dT}{dx},$$

där värmeledningskoefficienten

$$\lambda = \frac{1}{3}Cvl,$$

$C$  är värmekapaciteten per volymsenhet,  $v$  medelhastigheten och  $l$  fri medelvåglängd (partiklar).

Låt  $c$  vara värmekapaciteten för en fonon / partikel. Partikeln ger upp energin  $c\Delta T$  vid kollision efter att ha färdats sträckan  $l$ .

$$\Delta T = \frac{dT}{dx}l_x = \frac{dT}{dx}v_x\tau,$$

om  $\tau$  är relaxationstiden. Nettoflödet av energi blir

$$J_U = -nv_x^2c\tau\frac{dT}{dx},$$

där  $n$  är partikel- / fonontätheten.

$$\lambda = nv_x^2c\tau = \frac{1}{3}nv^2c\tau$$

För fononer är hastigheten samma för alla partiklar (enligt debyemodellen), så att

$$\lambda = \frac{1}{3} \underbrace{nc}_{=C} \underbrace{v\tau}_{=l} = \frac{1}{3}Cvl$$

Normala kollisioner begränsar inte  $\lambda$ . ( $\mathbf{k}_{in,1} + \mathbf{k}_{in,2} = \mathbf{k}_{ut}$ ,  $\hbar\omega_{in,1} + \hbar\omega_{in,2} = \hbar\omega_{ut}$ : Energiflödet ändras inte.) Det krävs anharmonicitet för kollisioner. Umklapp-kollision:

$$\mathbf{k}_{ut} = \mathbf{k}_{in,1} + \mathbf{k}_{in,2} \pm \mathbf{G}$$

Höga  $T$ :

$$n_{fononer} \propto T, l \propto \frac{1}{n} \sim \frac{1}{T}$$

## 5. Elektrongasen

Metall - lätttrörliga valenselektroner  $\Rightarrow$  gas av elektroner.

### 5.1 Frielektrongas

Antaganden:

- valenselektronerna bildar en gas av fria partiklar som ej växelverkar med jonerna eller med varandra
- Fermi-Dirac-statistik
- pauliprincipen
- ytbarriär som hindrar elektronerna att lämna metallen

Detta är en ganska korkad modell eftersom det måste finnas ett starkt fält från jonerna ( $\Rightarrow e^-$  ej fria) och coulombkrafter mellan elektronerna ( $\Rightarrow$  de är ej oberoende av varandra). Modellen fungerar dock för att beskriva elektronbidraget till både termiska, magnetiska och optiska egenskaper. Särskilt gäller detta för metaller som har s- och p-elektroner i yttersta skalet: alkalimetallerna, Ca, Mg, Al, Zn... (nära frielektronliknande).

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 10, måndag 9 februari 2004

## 5. Elektrongasen (forts)

Approximation: Jellium (Gelium), modellmetall för elektrongasteori, "framställs" genom att man mal de positiva jonerna till en homogen bakgrundsaddning (utan struktur).

### 5.2 Tillståndstäthet

Schrödingerekv:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = E\Psi$$

Ansätt

$$\begin{aligned}\Psi &= Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U &= E\end{aligned}$$

Tillståndstätheten i "energirummet":

$$N(E)dE = 2\frac{V}{(2\pi)^3}d^3k,$$

där tvåan är "Paulis tvåa" (d v s två elektroner i varje rumsvågfunktion [spin upp respektive ned]),  $\frac{V}{(2\pi)^3} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$  är tillståndstätheten i k-rummet och  $d^3k$  är volymen i k-rummet.  $E$  är konstant på en sfärisk yta i k-rummet. Använd  $d^3k = \underbrace{4\pi k^2}_{\text{yta}} \underbrace{dk}_{\text{tjocklek}}$

$$\Rightarrow N(E) = \frac{V}{4\pi^3} 4\pi k^2 \frac{1}{dE/dk}$$

Ur lösningen till schrödingerekvationen fås

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dk} &= \frac{\hbar^2 k}{m} \\ \Rightarrow N(E) &= \frac{V}{\pi^2} \frac{m}{\hbar^2} k = \frac{V}{\pi^2} \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}\end{aligned}$$

Sätt  $U = 0$

$$\Rightarrow N(E) = C\sqrt{E}$$

2D:

$$\begin{aligned}N(E)dE &= 2 \cdot \frac{A}{(2\pi)^2} \underbrace{d^2k}_{=2\pi k dk} \\ \Rightarrow N(E) &= \frac{A}{(2\pi)^2} 2\pi k \frac{1}{dE/dk} = \frac{A}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} = C'\end{aligned}$$

1D:

$$N(E) = C'' \frac{1}{\sqrt{E}}$$

**Fermi-Dirac-statistik: (Kittel, Appendix D)**

Besättningstalet

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

där kemiska potentialen,  $\mu$ , bestäms av att

$$\int_0^\infty dE N(E) f(E, T) = N,$$

där antal elektroner,  $N$ , ges av

$$N = n_{\text{valenselektroner}} \cdot N_{\text{atomer}}$$

Låt  $T = 0$

$$f(E, T = 0) = \begin{cases} 1 & \text{om } E < \mu \equiv E_F \\ 0 & \text{om } E > E_F \end{cases}$$

$E_F$  kallas fermienergin.

$$N = \int_0^\infty dE N(E) f(E, T = 0) = \int_0^{E_F} dE C \sqrt{E} 1$$

$$= C \left[ \frac{2}{3} E^{\frac{3}{2}} \right]_0^{E_F} = C \frac{2}{3} E_F^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3} E_F N(E_F)$$

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

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

$k_F$  är fermivägsvektorn.  $E_F$  fås lättast genom att först beräkna  $k_F$  och därefter  $E_F$  och  $N(E_F)$ .

(Kuriosa: Enrico Fermi var först med kontrollerad kärnreaktion. Han dog i cancer...)

I följande uttryck är tvåan Paulis tvåa,  $\frac{V}{8\pi^3}$  är tillståndstätheten och  $\frac{4\pi}{3} k_F^3$  är volymen i k-rummet:

$$N = 2 \frac{V}{8\pi^2} \frac{4\pi}{3} k_F^3$$

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

**Exempel**  $E_F$  för Al

Al är fcc (fyra atomer per cell) med  $a = 4,05 \text{ \AA}$  och valensen 3.

$$k_F = \left( 3\pi^2 \frac{4 \cdot 3}{a^3} \right)^{\frac{1}{3}} = 1,75 \text{ \AA}^{-1}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = 3,81 k_F^2 = 11,6 \text{ eV}$$

$$N(E_F) = \frac{3N}{2E_F} = \frac{3 \cdot 3}{2 \cdot 11,6} \frac{e^-}{\text{atom eV}}$$

Eftersom  $\frac{k_B T}{E_F} \ll 1$  är  $\mu$  svagt  $T$ -beroende.  $\mu(T = 0) = E_F$ .

**Övning: Kan en Na-kristall diffraktera sina egna valenselektroner?**

Omformulering: Skär fermisfären något brillouinzonplan? Na är bcc vilket medför att

$$\mathbf{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l), \quad h + k + l \text{ jämnt.}$$

Kortaste G-vektorn är därför

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

$$\Rightarrow |\mathbf{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$$

Jämför med  $k_F$ . Na har en valenselektron och bcc-cellen innehåller två atomer, så att

$$k_F = \left( 3\pi^2 \frac{2 \cdot 1}{a^3} \right)^{\frac{1}{3}} = \frac{(6\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{a}$$

$$\frac{1}{2} |\mathbf{G}_{hkl}| = \frac{\pi}{a}\sqrt{2} > \frac{\pi}{a} \left( \frac{6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Fermisfären når *inte* fram till närmaste BZ-plan så ingen diffraktion är möjlig.

- Experiment visar att alkalimetaller har fermiytor ( $E(\mathbf{k}) = E_F$ ) som är ungefär sfäriska.
- Al: Fermisfären skär två BZ-plan



### 5.3 Bidrag till $C_V$

Klassiskt:  $C_{V,e^-} = \frac{3N}{2}k_B$ . För metaller visar experiment att  $C_{V,e^-}$  är mycket, mycket mindre! Detta förklarades av W Pauli.

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

$$U(T) - U(0) \approx \underbrace{\frac{1}{2}N(E_F)}_{\text{antal elektroner}} \cdot 2k_B T \cdot \widehat{k_B T},$$

där den första termen är antal elektroner som ändrar energi och den andra är energiändringen per elektron.

$$C_{V,e^-} = \frac{dU}{dT} \approx 2N(E_F)k_B^2 T \propto T$$

Mer noggranna beräkningar ger

$$C_{V,e^-} = \frac{\pi^2}{3}N \underbrace{(E_F)}_{=-\frac{3N}{2E_F}} k_B^2 T \propto T$$

Sätt  $E_F = k_B T_F$

$$\Rightarrow C_{V,e^-} = \frac{\pi^2}{2}Nk_B \underbrace{\left(\frac{T}{T_F}\right)}_{\ll 1}$$

Frielektronmodellens ofullständighet visar sig av att  $\gamma_{exp} \neq \gamma_{teori}$  ( $C_{V,e^-} = \gamma T$ ).

$$\gamma_{teori} = \frac{\pi^2}{3}N(E_F)k_B^2 = \left\{ E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \right\} = \frac{\pi^2 k_B^2 N m e}{\hbar^2 k_F^2}$$

Sätt  $\frac{\gamma_{exp}}{\gamma_{teori}} = \frac{m^*}{m}$ .  $m^*$  kallas termiska massan. För nära-frielektronmetaller är  $\frac{m^*}{m} = 1 - 2$ ,  $\neq 1$  på grund av växelverkan med joner, elektroner och fononer.

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 11, torsdag 12 februari 2004

## 5.4 Elektrisk ledningsförmåga

Newtons ekvation:

$$\underbrace{\mathbf{F}}_{=-e\mathbf{E}} = \frac{d}{dt} \underbrace{(m\mathbf{v})}_{=\mathbf{p}} = \frac{d}{dt}(\hbar\mathbf{k}) = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$$

Slå på  $\mathbf{E}$  vid  $t = 0$ ; vid  $t = \tau$  är

$$\Delta\mathbf{k} = \frac{-e\mathbf{E}}{\hbar}\tau$$
$$\Rightarrow \Delta\mathbf{v} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m}$$

Fermisfären på drift, men kommer inte så långt. Låt  $\tau$  vara en karakteristisk tid mellan kollisioner, där elektronerna förlorar den tillförda rörelsemängden. Med elektrontätheten  $n$  fås strömtätheten

$$\mathbf{J} = n \underbrace{q}_{=-e} \Delta\mathbf{v} = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E}$$

Drude:  $\sigma_0$  är ledningsförmågan vid konstant fält  $\mathbf{E}$ . Fria medelväglängden

$$l = v_F\tau, l \sim 100 \text{ \AA}, v_F \sim 10^6 \text{ m/s}$$

**Tidsberoende fält**

Slå av fältet:

$$\mathbf{J}(t) = \mathbf{J}_0 e^{-t/\tau}, \text{ d v s}$$
$$\frac{d}{dt}\mathbf{J} + \frac{1}{\tau}\mathbf{J} = 0 \text{ utan fält}$$
$$\frac{d}{dt}\mathbf{J} + \frac{1}{\tau}\mathbf{J} = \frac{\sigma_0}{\tau}\mathbf{E} \text{ med fält}$$
$$m \underbrace{\frac{d}{dt}\mathbf{v}}_{=m\dot{\mathbf{x}}} + \underbrace{\frac{m}{\tau}\mathbf{v}}_{\text{friktion}} = \underbrace{-e\mathbf{E}}_{=\mathbf{F}}$$

Antag  $\mathbf{J} \sim e^{-i\omega t}$

$$\Rightarrow -i\omega\mathbf{J} + \frac{1}{\tau}\mathbf{J} = \frac{\sigma_0}{\tau}\mathbf{E}$$
$$\mathbf{J} = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau}\mathbf{E}$$

För optiska frekvenser,  $\omega\tau \gg 1$ , både accelererar och retarderar fältet elektroner på deras väg mellan kollisioner.

**Temperaturberoendet hos  $\sigma_0(\tau)$**

Metaller:  $\tau(l)$  begränsar kollisionen med fononer (dominerar för ren kristall), föroreningar och defekter. Hög temperatur (rumstemperatur):

$$\sigma_0 \propto \frac{1}{n_{\text{fononer}}} = e^{\hbar\omega/k_B T} - 1 \approx \frac{\hbar\omega}{k_B T} \propto \frac{1}{T}$$

Låg temperatur:

$$\rho_0 = \frac{1}{\sigma_0} \propto \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^5, \text{ även här fononer } (\omega = \frac{ck}{\hbar}), \mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{k}_{fononer}$$

Vid låga  $T$  ( $T \ll \Theta_D$ ) är bara små  $\omega$ -fononer tillgängliga ( $\omega \ll \omega_D$ )

$$\hbar\omega = ck \Rightarrow \text{bara små vågvektorer}$$

Små  $k$  är ej effektiva för att "vända" elektronerna. För lite högre  $T$  är dessa så kallade *umklapp*-processer mer sannolika.

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_{fonon} \pm \mathbf{G}_{hkl}$$

Med föroreningar:

$$\rho(T) = \rho_{ren}(T) + \underbrace{\rho_{oren}}_{\text{ej } T\text{-beroende}}$$

Ett grovt mått på defekttäthet är därför kvoten mellan  $\rho$  vid rumstemperatur och vid 4 K:

$$\frac{\rho_{RT}}{\rho_{4K}}$$

Varför är det  $e^-$ -jonkollisioner och inte  $e^-e^-$ -kollisioner som begränsar  $\sigma_0$ ?

- Elektrongasen är ju tät, så det borde finnas gott om elektroner att kollidera med... FEL!
  - Elektronerna växelverkar med starka krafter med lång räckvidd... FEL!
1. Om  $E$  bara är något större än  $E_F$ : Antag att två elektroner med vågvektorer  $\mathbf{k}_1$  och  $\mathbf{k}_2$  kolliderar med varandra och resulterar i vågvektorerna  $\mathbf{k}_3$  respektive  $\mathbf{k}_4$ . Då är  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$ , samt  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4$ . På grund av pauliprincipen kan de flesta elektroner inte delta i sådana kollisioner, bara de som ligger i närheten av fermiytan.
  2. "Skärming" reducerar växelverkan. Coulombpotentialen  $\frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r}e^{-\alpha r}$ ,  $\alpha$  ökar med  $n$ .

## 5.5 Elektrongasens optiska egenskaper

En metallyta bestrålas med intensiteten  $I_0$ . Den reflekterade strålningen blir  $R_\perp I_0$ . Bortsett från elektronövergångar beror  $R_\perp$  på  $\omega$  i stort sett på följande sätt

$$R_\perp \approx \begin{cases} 1 & , \text{ om } \omega < \omega_p \\ 0 & , \text{ om } \omega > \omega_p \end{cases}$$

där  $\omega_p$  är specifikt för varje metall. Minskningen beror ej på absorption. En tunn film av t ex Al blir transparent för  $\hbar\omega > 15$  eV. För natrium gäller detta då  $\hbar\omega > 5,7$  eV. Förklaringen till detta är att vid närvaro av ett elektromagnetiskt fält rör sig elektronerna så att fältet skärmas ut i metallen och strålningen reflekteras. Över en viss frekvens är detta inte möjligt på grund av att elektronerna inte kan röra sig tillräckligt snabbt för att skärma ut fältet. Den kritiska frekvensen kallas plasmafrequensen,  $\omega_p$ .

Från optiken har vi att

$$R_\perp = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2,$$

där  $N = n + ik$  är det komplexa brytningsindexet.

$$\Rightarrow R_\perp = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$

Maxwell:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} = \underbrace{\hat{\sigma}\mathbf{E}}_{\text{ledningsström}} + \underbrace{\hat{\varepsilon}\frac{d\mathbf{E}}{dt}}_{\text{förskjutningsström}} = \begin{cases} \sigma\mathbf{E} \\ \varepsilon\frac{d\mathbf{E}}{dt} \end{cases},$$

$$\hat{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau}$$

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_{jon}\varepsilon_0$$

Optiska egenskaper beskrivs av någon av följande:

- ledningsförmåga (konduktivitet):  $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$
- dielektricitetsfunktionen:  $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r = \varepsilon_0(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2)$
- brytningsindex:  $N = n + ik$

Det gäller att

$$N^2 = \varepsilon_r$$

$$\sigma\mathbf{E} = \varepsilon\frac{d\mathbf{E}}{dt}, \text{ d v s}$$

$$\sigma = -i\omega\varepsilon = -i\omega\varepsilon_0(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2)$$

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 12, måndag 16 februari 2004

## 5.5 Elektrongasens optiska egenskaper (forts)

Vi hade att

$$\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2 = -i\omega\varepsilon_0 \underbrace{(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2)}_{=\varepsilon_r},$$

det vill säga

$$\sigma_1 = \omega\varepsilon_0\varepsilon_2$$

$$\sigma_2 = -\omega\varepsilon_0\varepsilon_1$$

och även, sedan tidigare

$$\hat{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1-i\omega\tau}, \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}.$$

Vad blir  $\varepsilon_r$  för elektrongasen? Insättning ger

$$\hat{\sigma} = \underbrace{\frac{i\omega}{1+i\omega\tau}}_{\frac{d\mathbf{E}}{dt} = -i\omega\mathbf{E}} \cdot \underbrace{\varepsilon_0\varepsilon_{jon}}_{=\varepsilon} = \underbrace{-i\omega\varepsilon_0\varepsilon_r}_{=\sigma}$$
$$\Rightarrow \frac{\sigma_0}{1+i\omega^2\tau^2}(1+i\omega\tau) - i\omega\varepsilon_0\varepsilon_{jon} = -i\omega\varepsilon_0(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2)$$

Identifiera real- och imaginärdelar:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{jon} - \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0(1+\omega^2\tau^2)}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0(1+\omega^2\tau^2)}$$

För optiska frekvenser gäller då

$$\varepsilon_{jon} \approx 1, \quad \omega\tau \gg 1$$

$$\Rightarrow 1 + \omega^2\tau^2 \approx \omega^2\tau^2$$

$$\Rightarrow \varepsilon_1 = 1 - \frac{\sigma_0\tau}{\varepsilon_0\omega^2\tau^2} = 1 - \frac{ne^2\tau/m}{\varepsilon_0\omega^2\tau} = 1 - \frac{ne^2}{m\varepsilon_0\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \omega_p = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{ne^2\tau/m}{\varepsilon_0\omega^2\tau^2} = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \frac{1}{\omega\tau}$$

För att beräkna  $R_{\perp}$  behöver vi  $N = n + ik$

$$\varepsilon_r = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = N^2 = (n + ik)^2 = n^2 - k^2 + 2ink$$

Identifiering ger

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2$$

$$\varepsilon_2 = 2nk$$

Vi kan se att

$$\omega \lesssim \omega_p \Rightarrow \varepsilon_1 \text{ litet}, < 0 \Rightarrow n \ll 1 \Rightarrow R_{\perp} = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \approx 1$$

$$\omega \gg \omega_p \Rightarrow \varepsilon_2 \text{ litet}, \varepsilon_1 > 0 \Rightarrow n \approx 1, k \ll n \Rightarrow R_{\perp} \approx 0$$

## 5.6 Plasmasvängningar, plasmoner

Antag att en lamell av elektrongas förskjuts en sträcka  $x$  i förhållande till den positiva bakgrunden (utsmetade joner). Ett elektriskt fält uppstår med fältstyrkan

$E = \frac{Q}{A\epsilon_0} = \frac{nexA}{A\epsilon_0} = \frac{nex}{\epsilon_0}$ ,  
 där  $Q = nexA$  är den laddning som jonerna i volymen  $x \cdot A$  har och  $A$  är lamellens tvärsnittsarea. Newton:

$$m\ddot{x} = -e \cdot \frac{nex}{\epsilon_0} = -\frac{ne^2}{\epsilon_0}x$$

Ansätt

$$x = x_0 \sin \omega t$$

$$\Rightarrow -m\omega^2 = -\frac{ne^2}{\epsilon_0}$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0} = \omega_p^2$$

Plasmasvängningar och deras energikvanta,  $\hbar\omega_p$ , kallas plasmoner. De lyder Bose-Einstein-statistik (liksom fotoner och fononer). Men

$$\bar{n}_{plasmoner} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

är väldigt litet varför plasmasvängningar ej förekommer spontant.

## Repetition av frielektronmodellen för metaller

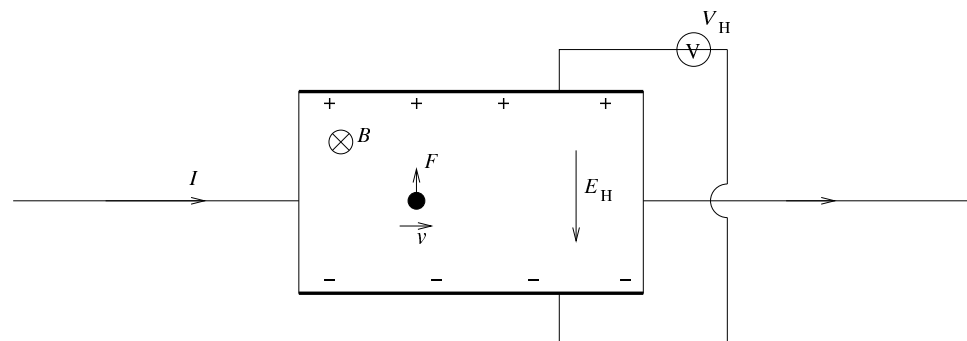
### Framgångar

- Värmekapacitiveteten
- Värmeledningsförmågan
- Elektrisk ledningsförmåga

### Brister

- Skillnader mellan metaller och isolatorer ( $\rho_{metall} \approx 10^{-10} \Omega \text{ cm}$ ,  $\rho_{isolator} \approx 10^{27} \Omega \text{ cm}$ )
- Elektrontransport i närheten av magnetfält

## 5.7 Hallspänningen



Halleffekten

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{J} = nq\mathbf{v}$$

Vid jämvikt gäller att

$$qvB = qE_H$$

Hallkoefficienten

$$R_H = \frac{1}{nq}, V_H = R_H I$$

Experiment visar ofta ett annat resultat för material som annars beskrivs väl av frielektronmodellen. Vi behöver en mindre naiv modell! (Se föreläsning 13 för en bättre redogörelse för hallspänningen!)

## 6. Elektroner i periodisk potential

### 6.1 Energigap där diffraktionsvillkoret är uppfyllt

Vid atomernas positioner känner valenselektronerna av en potentialgrop. Djupa potentialgropar kan ge bundna tillstånd. Betrakta först en potential med grundare gropar. Om elektronens våglängd är betydligt större än avståndet mellan atomerna ( $k \ll \frac{2\pi}{a}$ ,  $\lambda \gg a$ ) "ser" elektronen ett medelvärde av potentialen  $U(x)$ . Då blir energin

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

För  $k = \pm \frac{\pi}{a}$  uppfylls diffraktionsvillkoret ( $\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}_{100} = \frac{1}{2} |\mathbf{G}_{100}|$ ) och stående vågor fås:

$$\Psi_{\pm} = A (e^{i\frac{\pi}{a}x} \pm e^{-i\frac{\pi}{a}x}) = \begin{cases} 2A \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \\ i2A \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \end{cases}$$

$$|\Psi_+|^2 = 4A^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

$$|\Psi_-|^2 = 4A^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

$|\Psi_+|^2$  och  $|\Psi_-|^2$  är mått på elektrontätheten i  $x$ . Perioden är densamma som för potentialen  $U(x)$  och för en av vågfunktionerna kommer elektrontätheten vara liten (noll) vid maxpotentialen, medan den för den andra vågfunktionen kommer att vara stor. Det blir därför en skillnad i elektronens energi beroende på vilken av de båda vågfunktionerna elektronen lyder. Ett energigap uppstår i  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ .

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 13, tisdag 17 februari 2004

## 5.7 Hallspänningen (igen)

Referera till figuren i föreläsning 12, med tillägg att höjden på lådan är  $W$ , djupet är  $d$ , kraften på elektronen på grund av magnetfältet är  $\mathbf{F}_B$  och kraften på grund av elfältet är  $\mathbf{F}_E$ .

$$\mathbf{F}_B = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} = qvB(\hat{x} \times \hat{z}) = -qvB\hat{y}$$

$$\mathbf{F}_E = q\mathbf{E}_H = qE_H\hat{y}$$

Vid jämvikt:

$$\mathbf{F}_B + \mathbf{F}_E = 0 \Leftrightarrow (-qvB + qE_H)\hat{y} = 0$$

Strömmen

$$I = WdnqE_H/B = \{V_H = E_HW\} = \frac{nqd}{B}V_H$$

$$\Rightarrow V_H = \underbrace{\frac{1}{nqd}}_{=R_H} BI$$

## 6. Elektroner i periodisk potential

1.  $\lambda \gg a$ ,  $U(X)$  liten effekt  $\Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$  (fri elektron)

2.  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ , diffraktionsvillkoret uppfyllt,  $e^{ikx} \rightarrow \pm e^{-ikx}$

$$\Psi_{\pm}(x) = e^{ikx} \pm e^{-ikx} = \{k = \frac{\pi}{a}\} = \begin{cases} 2 \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \\ i2 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \end{cases}$$

### 6.2 Energigapets storlek

Normera  $\Psi_{\pm}(x)$ :

$$\int dV |\Psi_{\pm}|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \Psi_{\pm} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{V}} \cos\left(\frac{1}{2}Gx\right) \\ i\sqrt{\frac{2}{V}} \sin\left(\frac{1}{2}Gx\right) \end{cases}, G = \frac{2\pi}{a}$$

Låt  $H_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ .

$$\text{SE: } \begin{cases} H_0\Psi_+(x) + U(x)\Psi_+(x) = E_+\Psi_+(x) & (1) \\ H_0\Psi_-(x) + U(x)\Psi_-(x) = E_-\Psi_-(x) & (2) \end{cases}$$

Tag (1)  $\cdot \Psi_+^*(x)$  - (2)  $\cdot \Psi_-^*(x)$  och integrera över rummet

$$\Rightarrow I_1 + I_2 = E_+ - E_-,$$

där

$$I_1 = \int dV (\Psi_+^*(x)H_0\Psi_+(x) - \Psi_-^*(x)H_0\Psi_-(x))$$



$$= \frac{2}{V} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{2}G\right)^2 \cdot \int dV \underbrace{\left(\cos^2\left(\frac{1}{2}Gx\right) - \sin^2\left(\frac{1}{2}Gx\right)\right)}_{=\cos(Gx)}$$

$$I_2 = \int dV \underbrace{(\Psi_+^*(x)U(x)\Psi_+(x) - \Psi_-^*(x)U(x)\Psi_-(x))}_{=0}$$

$$= \frac{2}{V} \int dV dV U(X) \underbrace{\left(\cos^2\left(\frac{1}{2}Gx\right) - \sin^2\left(\frac{1}{2}Gx\right)\right)}_{=\cos(Gx)}$$

Välj  $x$  så att  $U(-x) = U(x)$ !

$$\Rightarrow I_2 = \frac{2}{V} \int dV U(x) e^{iGx} \equiv 2U_G,$$

$U_G$  är fourierkomponenten i  $U(x)$ . Vi får bandgapet

$$E_+ - E_- = 2U_G, U_G < 0$$

$U_G$  kan uttryckas i de enskilda jonpotentialernas fourierkomponenter.

$$U(x) = \sum_j v(x - x_j),$$

där  $v(\rho)$  är den enskilda jonens potential, och  $x_j$  är positionen för jon  $j$ .

$$U_G = \frac{1}{V} \int dV \sum_j v(x - x_j) e^{-iG(x-x_j)} e^{-iGx_j}$$

Med totala volymen  $V = N\Omega_{cell}$ , där  $N$  är antal celler och  $\Omega_{cell}$  är varje cells volym fås

$$U_G = \underbrace{\frac{1}{\Omega_{cell}} \int d\rho v(\rho) e^{-iG\rho}}_{V_G} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_j e^{-iGx_j}}_{\text{kristallsumman}}$$

$$x_j \rightarrow \mathbf{r}_j = \underbrace{m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}}_{\text{gitter}} + \underbrace{\mathbf{R}_j}_{\text{bas}}$$

$$\sum_j e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_j} = \underbrace{\sum_{\text{bas}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_j}}_{=S^*} \underbrace{\sum_{\text{gitter}} e^{-i\mathbf{G}\cdot(m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c})}}_{=N}$$

$$\Rightarrow U_G = v_G S^*$$

$S^*$  kan vara noll om det finns mer än en atom i basen. (Jämför med  $S_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{G}_{hkl}\cdot\mathbf{R}_j}$ .)

### 6.3 Beräkning av $E(\mathbf{k})$

**A** Blochteoremet (utan bevis)

Periodisk potential  $\Rightarrow \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , där  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  har gittrets periodicitet, det vill säga  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \Rightarrow |\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = |u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$ , lika i alla celler.

**B**  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  och  $U(\mathbf{r})$  är båda periodiska, så utveckla i fourierserier:

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

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{\mathbf{G}_j} e^{-i\mathbf{G}_j\cdot\mathbf{r}} \Rightarrow \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{\mathbf{G}_j} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G}_j)\cdot\mathbf{r}}$$

**C** Sätt in i SE (låt  $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ )

$$-\nabla^2 \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \sum_j [(\mathbf{k} - \mathbf{G}_j)^2 - E] \alpha_{\mathbf{G}_j} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{r}} + \sum_{i,j} U_{\mathbf{G}_i} \alpha_{\mathbf{G}_j} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{r}} = 0$$

Multiplicera med  $\frac{1}{V} e^{i\mathbf{G}_p \cdot \mathbf{r}}$  och integrera över rummet! Eftersom  $\frac{1}{V} \int dV e^{i\mathbf{G}_p \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{G}_p, \mathbf{G}_j}$

reduceras SE till

$$[(\mathbf{k} - \mathbf{G}_p)^2 - E] \alpha_{\mathbf{G}_p} + \sum_j U_{\mathbf{G}_p - \mathbf{G}_j} \alpha_{\mathbf{G}_j} = 0$$

Ingen approximation hittills! På grund av periodiciteten har vi fört över DE till ett system av vanliga ekvationer, en ekvation för varje  $\mathbf{G}_p$ .

## D

1. Förfärdiga en potential

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j v_{jon} + \underbrace{\text{medelpotential p g a andra valenselektroners inverkan}}_{\text{approximation, jobb för specialister}}$$

2. Utveckla  $U(\mathbf{r})$  i fourierserie

3. Ansätt vågfunktionen  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{\mathbf{G}_j} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{r}}$  med så många termer

som datorn klarar av eller som verkar rimligt. Lös för  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , gör en ny potential,  $U(\mathbf{r})$ , (beror på  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , de andra elektronerna) och iterera till konvergens.

**Exempel** Enkelt fall för papper och penna!

Sätt  $U_{\mathbf{G}_1} = -U_{\mathbf{G}_{-1}} \neq 0$ , övriga  $U_{\mathbf{G}_j} = 0$ . För 1D:

$$u(x) = u_{G_1} e^{-iG_1 x} + u_{G_{-1}} e^{iG_1 x} = 2u_{G_1} \cos G_1 x$$

Ansätt

$$\Psi_k(x) = \alpha_{G_0} e^{ikx} + \alpha_{G_1} e^{i(k-G_1)x}$$

$$p = 0: \left[ (k - \underbrace{G_0}_{=0})^2 - E \right] \alpha_{G_0} + \underbrace{U_{G_0}}_{=0} \alpha_{G_0} + U_{G_{-1}} \alpha_{G_1} = 0$$

$$\Leftrightarrow \alpha_{G_0} (k^2 - E) = -\alpha_{G_1} U_{G_{-1}} = \alpha_{G_1} U_{G_1}$$

$$p = 1: [(k - G_1)^2 - E] \alpha_{G_1} + U_{G_1} \alpha_{G_0} + \underbrace{U_{G_0}}_{=0} \alpha_{G_1} = 0$$

$$\Leftrightarrow \alpha_{G_0} U_{G_1} = -\alpha_{G_1} [(k - G_1)^2 - E]$$

$$\Rightarrow (E - k^2) [E - (k - G_1)^2] = U_{G_1}^2 \text{ allmänt}$$

Låt  $k = \frac{1}{2}G_1$  (vid BZ-plan)

$$E = \left(\frac{1}{2}G_1\right)^2 \pm U_{G_1} \text{ (Energibandgap vid } k = \frac{1}{2}G_1)$$

Allmän lösning

$$\frac{\alpha_{G_{-1}}}{\alpha_{G_0}} = \frac{k^2 - E}{-u_{G_{-1}}} = \frac{E - k^2}{u_{G_{-1}}} \text{ varierar från 0 till 1, det vill säga } k \text{ varierar från 0}$$

till  $\frac{1}{2}G_1$ . (?)

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 14, torsdag 19 februari 2004

## 6.4 Energibanddiagram

Studera figur 4, sid 238 i Kittel! På grund av gitterets periodicitet finns inget specifikt rätt värde på  $\mathbf{k}$ . Värdet är obestämt upp till en reciprok gittervektor,  $\mathbf{G}$ . Det är bekvämt att återföra  $\mathbf{k}$  till första BZ

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G},$$

där  $\mathbf{k}'$  är  $\mathbf{k}$ -vektorn i första BZ och  $\mathbf{k}$  är den obegränsade  $\mathbf{k}$ -vektorn. Det reducerade zonschemat erhålls då.

**Exempel 2D**, kubiskt gitter

Första brillouinzonens begränsningsyta blir en kvadrat med centrum i origo och sidan  $\frac{2\pi}{a}$ . Energin i  $k_x = \frac{\pi}{a}$  är

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

1. Betrakta intervallet  $k_y = 0$ ,  $-\frac{2\pi}{a} \leq k_x \leq -\frac{\pi}{a}$ .  $k$  ligger då utanför första BZ och vi återför med  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ . Energin i intervallets gränser blir

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k'_x - \frac{2\pi}{a})^2 = \begin{cases} 4E_0 & , \text{om } k_x = 0 \\ E_0 & , \text{om } k_x = \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

2. Betrakta intervallet  $k_y = 0$ ,  $\frac{2\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{3\pi}{a}$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k'_x + \frac{2\pi}{a})^2 = \begin{cases} 4E_0 & , \text{om } k_x = 0 \\ 9E_0 & , \text{om } k_x = \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

3. Betrakta intervallet  $k_y = -\frac{2\pi}{a}$ ,  $0 \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + (\frac{2\pi}{a})^2) = \begin{cases} 4E_0 & , \text{om } k_x = 0 \\ 5E_0 & , \text{om } k_x = \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

**Metall eller isolator?**

Hur många tillstånd finns det i ett band? Periodiska randvillkor (period  $L$ ) ger för 1D:

$$k = m \frac{2\pi}{L}, \quad m \in \mathcal{Z}$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}, \quad 1 \text{ BZ: } -\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$$

$$\frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a} = N = \text{antal celler}$$

Samma i 3D,  $N$   $k$ -tillstånd per band, det vill säga  $2N$  tillstånd per band (två elektrontillstånd per  $k$ -tillstånd, med olika spin).

Om valenselektronerna precis fyller ett eller flera energiband medan de övriga är tomma har vi en isolator. (Energigap mellan banden nödvändigt.) Ett svagt

elektriskt fält kan inte lyfta upp en elektron över energigapet och ingen ström erhålls.

*Kristallen* kan vara en isolator *enbart* om antalet valenselektroner är jämnt. Även om detta är uppfyllt kan kristallen vara en metall, om energibanden överlappar varandra, ex alkaliska jordartsmetallerna Be, Mg som har två valenselektroner per cell, men energiband som överlappar.

Om antalet valenselektroner är udda har vi alltid en metall, ex alkalimetallerna Na, K som har en valenselektron per primitiv cell. (Observera att detta endast gäller kristaller!)

### Exempel Diamant, Si, Ge

Två atomer per cell, med jämnt antal valenselektroner ( $2m$ ), det vill säga  $4m$  valenselektroner per cell. Energibanden överlappar ej. Dessa material är därför isolatorer.

### Exempel 2D, kvadratisk gitter, en atom per cell

Låt gittret ha gitterparametern  $a$ .

1. En elektron per atom, plats för två elektroner per atom i första BZ

- (a) Fria elektroner:

$$\underbrace{\pi k_F^2}_{\text{Fermisfärens area}} = \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2}_{\text{1:a BZ area}}$$

$$\Rightarrow k_F = \underbrace{\sqrt{\frac{2}{\pi}}}_{<1} \frac{\pi}{a}$$

Fermisfären får plats helt och hållet i första BZ.

- (b) Energisprång vid zongränserna:  
Fermisfären ändras endast där den ligger nära ett BZ-plan där den "sugs" mot planet.

2. Två elektroner per atom

- (a) Fria elektroner:

$$\pi k_F^2 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$$

$$\Rightarrow k_F = \underbrace{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}_{>1} \frac{\pi}{a}$$

Fermisfären får *inte* plats helt och hållet i första BZ. BZ-hörnen är dock fortfarande fria.

- (b) Små energisprång:  
Fortfarande metall eftersom det fortfarande finns några få lediga tillstånd vid fermiytan.
- (c) Större energisprång:  
Fermisfären täcker första BZ helt och inga lediga tillstånd finns. Materialet är en isolator.

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 15, måndag 23 februari 2004

## 6.4 Energibanddiagram (forts)

### Experimentell information om $E(\mathbf{k})$ (dispersionrelationen)

Mät till exempel optisk absorption, genom att mäta  $R_{\perp}$  och  $T_{\perp}$  för en tunn film. Information kan då erhållas om  $\varepsilon_r = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ . ( $\varepsilon_2$  är ett mått på absorptionen av elektromagnetiska fält.)

1. Direkta övergångar. En elektron i valensbandet (under ferminivån), med energin  $E_i$ , exciteras av en foton med energin  $\hbar\omega$  till ledningsbandet (över ferminivån), till energin  $E_f$  genom en umklappprocess. Det gäller då att
$$E_f - E_i = \hbar\omega$$
$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \mathbf{G}_{hkl}$$
 (Fotonens vågvektor kan försummas.)
2. Indirekta övergångar. Fotonassisterade övergångar (svagare absorption).
$$E_f - E_i = \hbar\omega + \hbar\Omega,$$
där  $\hbar\Omega$  är fononens energi.
$$\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f = \underbrace{\mathbf{k}_{\text{fonon}}}_{\text{stor}}$$

### Varför är koppar röd (och silver vit)?

Ädelmetallerna har fyllda d-band några eV under fermienergin. Fotoner med minst denna energi absorberas. Tillståndstätheten är hög för d-banden eftersom de har liten dispersion.

$$\frac{dE}{dk} \text{ liten} \Rightarrow N(E) \propto \frac{1}{dE/dk} \text{ stor}$$

För koppar ligger dessa d-band så att det ljus med större energi än rött ljus absorberas, medan för silver avståndet mellan d-banderna och ledningsbanden är större så att absorptionen börjar först i UV-området.

## 6.5 Elektronernas rörelse i fält

Vilken rörelseekvation styr elektronernas rörelse?

$$\text{Fri elektron: } \frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = \mathbf{F}$$

$$\text{I kristall: } \frac{d}{dt}(\hbar\mathbf{k}) = \mathbf{F}$$

Antag att vi har ett vågpaket som är uppbyggt av vågor i ett intervall  $\Delta k$  kring

$\mathbf{k}$ . Gruppshastigheten  $v_g$  ges av  $\frac{d\omega}{dk}$ .

$$E = \hbar\omega$$

$$\Rightarrow v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\mathbf{k})}{dk} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

Effekten av gitterpotentialen återspeglas av dispersionsrelationen  $E(\mathbf{k})$ . Elektronen påverkas inte bara av den yttre kraften utan även av en kraft från gitterpotentialen, så att

$$\frac{d}{dt}(mv) \neq F$$

Visa att  $\frac{d}{dt}(\hbar\mathbf{k}) = \mathbf{F}$ ! Inses på följande sätt:

Energien som tillförs av ett elektriskt fält  $\mathcal{E}$  under en tid  $\delta t$  är

$$\delta E = \underbrace{-e\mathcal{E}}_{=F} \underbrace{v_g \delta t}_{=\delta x} \quad (1)$$

men

$$\delta E = \frac{dE}{dk} \delta k = \hbar v_g \delta k \quad (2)$$

(1) och (2) ger

$$\delta k = \frac{-e\mathcal{E}}{\hbar} \delta t$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}(\hbar\mathbf{k}) = \underbrace{-e\vec{\mathcal{E}}}_{=\mathbf{F}}$$

Resultatet gäller även för magnetiska fält, lorentzkraften  $\mathbf{F} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ . Eftersom

$$\hbar\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

så fås

$$\frac{d}{dt}(\hbar\mathbf{k}) = -\frac{e}{\hbar} (\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})) \times \mathbf{B},$$

det vill säga rörelsen i ett magnetfält i  $k$ -rummet är vinkelrät mot  $B$ -fältet och  $\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ . Rörelsen sker längs en yta med konstant energi. Detta kan användas för att få experimentell information om hur fermiytan ser ut. (de Haas von Alpen gjorde detta.)

## 6.6 Effektiv elektronmassa, $m^*$

- Fria elektroner:  $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ ,  $\frac{1}{m}$  bestämmer krökningen.
- Energiband:  $E(\mathbf{k})$  skiljer sig från frielektronuttrycket.

Låt krökningen (vid maxima eller minima i  $E(\mathbf{k})$ ) definiera en *effektiv* massa  $m^*$  så att  $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$ . Vi hade ovan att

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

$$\underbrace{\frac{d}{dt} v_g}_{\text{acceleration}} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \underbrace{\frac{dk}{dt}}_{=\frac{F}{\hbar}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \underbrace{F}_{\text{kraft}}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

Koll: fri elektron,  $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Rightarrow \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m}$ , ok!

### Exempel GaAs

I  $\Gamma$ -punkten gäller för ledningsbandet att  $\frac{d^2 E}{dk^2} > 0 \Rightarrow \frac{1}{m^*} > 0 \Rightarrow m^* > 0$ . ( $m^* = 0,067m_e$ ) I valensbandet är  $\frac{d^2 E}{dk^2} < 0 \Rightarrow m^* < 0$ , vilket leder till begreppet hål.

### Tolkning av $m^* \neq m$

En elektron reagerar på ett yttre fält som om den hade en effektiv massa  $m^*$ . Varför? Rörelsemängd överförs mellan elektron och gitter. Newtons lag gäller för totalen (elektron + gitter).

### Illustration

Antag att vi har svag gitterpotential.

- Mitt i BZ är  $\Psi_k(x) \sim e^{ikx}$  och elektronen har rörelse  $\sim \hbar k$ ,  $m^* \approx m$
- Vid BZ-planen är  $\Psi_k(x) \sim e^{ikx} + e^{i(k-G)x}$  och elektronen har rörelsemängd  $\approx 0$ ,  $m^* < m$

Överföringen av rörelsemängd från elektron till gitter är större än från gitter till elektron.

### 6.7 Hålbegreppet

Vid absorption av en foton lämnar en elektron med vågvektorn  $\mathbf{k}_e$  det fulla valensbandet och hoppar upp till det tomma ledningsbandet. Det medför att valensbandet får en brist på en elektron.

#### Reflektioner

1. Summan av alla vågvektorer i ett fyllt skal är noll. Det följer av att inversionssymmetri ( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ) råder i de gitter som är aktuella för oss (även reciproka gitter). Då har en BZ i reciproka gittret inversionssymmetri. Alla par  $\mathbf{k}$  och  $\mathbf{k}'$  är fyllda om hela bandet är fyllt. Om en elektron då saknas följer att hela bandet har vågvektorn  $-\mathbf{k}_e$ . Vi tolkar detta som ett hål med vågvektorn  $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$ .

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 16, tisdag 24 februari 2004

## 6.7 Hålbegreppet (fortsättning)

1. (Från förra föreläsningen.) Summan av alla vågvektorer i ett fyllt skal är noll. Det följer av att inversionssymmetri ( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ) råder i de gitter som är aktuella för oss (även reciproka gitter). Då har en BZ i reciproka gittret inversionssymmetri. Alla par  $\mathbf{k}$  och  $\mathbf{k}'$  är fyllda om hela bandet är fyllt. Om en elektron då saknas följer att hela bandet har vågvektorn  $-\mathbf{k}_e$ . Vi tolkar detta som ett hål med vågvektorn  $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$ .
2. Låt  $E = 0$  vid toppen av valensbandet. Ju längre ner i valensbandet som elektronen saknas, desto högre energi har systemet (mer energi har tillförts för att lyfta bort elektronen). Antag symmetriskt energiband. Då är
$$\underbrace{E_e(\mathbf{k}_e)}_{<0} = E_e(-\mathbf{k}_e) = -\underbrace{E_h(-\mathbf{k}_e)}_{>0} = -\underbrace{E_e(\mathbf{k}_h)}_{>0}$$
3. 
$$\underbrace{\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_h(\mathbf{k}_h)}_{=\mathbf{v}_h} = \underbrace{\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_e(\mathbf{k}_e)}_{=\mathbf{v}_e}$$
4. 
$$m_h = -m_e, \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \begin{cases} < 0 & , \text{elektronband} \\ > 0 & , \text{hålband} \end{cases} \right)$$
5. Rörelseekvationen
6. 
$$\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{k}_e = -e \left( \vec{\mathcal{E}} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B} \right)$$
$$\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{k}_h = +e \left( \vec{\mathcal{E}} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B} \right) \text{ (hålet har positiv laddning)}$$
$$\mathbf{J}_e = -e\mathbf{v}_e, \mathbf{J}_h = e\mathbf{v}_h \text{ ger nettoström} = 2\mathbf{J}_h.$$

## 7. Halvledare

### 7.1 Inledning

Några exempel på halvledare (och deras bandgap). Grupp

IV: Si (1,11 eV), Ge (0,66 eV), båda med indirekta bandgap

III-V: GaAs (1,43 eV), GaP (2,25 eV) direkta bandgap

II-VI: CdS (2,42 eV), CdTe (1,44 eV)

IV-IV: SiC (3 eV)



Halvledare är tekniskt intressanta av flera orsaker, bland annat på grund av att ledningsförmågan och fermienergin kan kontrolleras.

### Ledningsförmåga

Ledningsförmågan,  $\sigma$ , kan kontrolleras via halten av vissa föroreningsatomer som påverkar tätheten av elektroner,  $n$ , i ledningsbandet och hål,  $p$ , i valensbandet. Dessa föroreningar kallas dopämnen.

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_e}{m_e} + \frac{pe^2\tau_h}{m_p} = ne\mu_e + pe\mu_h$$

$m_e$  och  $m_p$  är effektiva massan för elektroner i ledningsbandet respektive hål i valensbandet,  $\mu_e = \frac{v_e}{\mathcal{E}}$  är mobiliteten för elektroner med motsvarande för hål,  $\mathcal{E}$  är det elektriska fältet.

$$\mathbf{J} = nev_e + pev_h = (ne\mu_e + pe\mu_h)\mathcal{E}$$

- Intrinsiciska halvledare (egenledare)  
Dophalten låg, varför  $\sigma$  bestäms av det rena ämnets egenskaper
- Extrinsiciska halvledare (störledare)  
 $\sigma$  bestäms av halten dopämne

### Fermienergin

Fermienergin,  $\mu$ , (kemiska potentialen) bestäms av dophalten. Detta gör det möjligt att bygga in potentialskillnader mellan olika delar av halvledaren (ex kvantbrunn).

### Optoelektronik

Halvledare med direkta bandgap (typ GaAs) används i optoelektronik, såsom halvledarlasrar, lysdioder och fotodetektorer.

### 7.2 Dopämnets energinivå

Si, Ge: 4 valenselektroner per atom, kovalenta bindningar till fyra närmaste grannar i en tetraedersymmetri.

Donatorer: 5-värda (fem valenselektroner), ex P, As, Sb, Bi.

Acceptorer: 3-värda, ex B, Al, In, Ga.

Dopatomerna substituerar värdatomerna, det vill säga de intar ordinarie gitterplatser.

### Med donatorer

Fyra av fem valenselektroner ingår i kovalenta bindningar med grannarna. Den femte blir löst bunden till donatorn, så löst att det är en god chans att den rycks loss då  $T \neq 0$  på grund av termisk excitation.

$$V_D(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r}$$

Elektronen rör sig med en effektiv massa  $m_e$  (Si:  $m_e = 0,2m$ ). I övrigt som för väteatomen. Grundtillstånd

$$E_D = -\frac{m_e}{m} \frac{1}{\epsilon_r^2} \underbrace{E_H}_{=13,6 \text{ eV}} = -20 \text{ meV}$$

Jämför med termiska energier, vid RT är  $k_B T = 25 \text{ meV}$ . ( $E_H$  är väteatomens grundtillståndensenergi.) Typiska bindningsenergies: 40 - 100 meV (Sb 40 meV, P 45 meV, As 55 meV, B 70 meV).

Den energi som gör det möjligt för elektronen att röra sig fritt kallas referensnivå och är densamma som energin vid ledningsbandets minimum. Dopnivån är besatt vid  $T = 0$ , men vid RT är det en god chans att elektronerna donerats till ledningsbandet.

### Med acceptorer

Omvänt resonemang som med donatorer. Acceptorn är tom vid  $T = 0$ , men vid RT är det en god chans att det skapas hål i valensbandet genom att nivån fylls.

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 17, torsdag 26 februari 2004

## 7.3 Beräkna $n$ (elektroner i ledningsbandet), $p$ (hål i valensbandet) samt $\mu$ (ferminivån)

Låt  $E = 0$  vara energin i toppen av valensbandet,  $E_g$  energigapet mellan valensbandet och ledningsbandet. Tillståndstätheten i valensbandet är

$$N_V(E) \propto \sqrt{-E}$$

och i ledningsbandet

$$N_L(E) \propto \sqrt{E - E_g}$$

Besättningstalet (sannolikheten att ett tillstånd med energin  $E$  är besatt) är

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

$$n = \int_{E_g}^{\infty} N_L(E) f(E) dE$$

$$p = \int_{-\infty}^0 N_V(E) [1 - f(E)] dE$$

Oftast är  $E_g - \mu \gg k_B T$  och  $\mu \gg k_B T$

$$\Rightarrow f(E) \approx e^{(\mu-E)/k_B T}$$

$$\Rightarrow n = \dots = n_0 e^{(\mu-E_g)/k_B T}, \quad n_0 = \left(\frac{2m_e k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$p = \dots = p_0 e^{-\mu/k_B T}, \quad p_0 = \left(\frac{2m_h k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$m_e$  och  $m_h$  är de effektiva massorna för elektron i ledningsbandet respektive hål i valensbandet.  $\mu$  beror på båda dophalten (och något på temperaturen,  $T$ ), men

$$np = n_0 p_0 e^{-E_g/k_B T}$$

är oberoende av dophalten. Med  $m_e = m_h = m$  är  $n_0 = p_0 = 2,5 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$  vid RT.

**Exempel** Ren halvledare ( $N_D = 0$ )

Ledningsbalans råder, det vill säga

$$n = p \quad (1).$$

$$np = n_0 p_0 e^{-E_g/k_B T} \quad (2)$$

$$n = p = \sqrt{n_0 p_0} e^{-E_g/2k_B T} \quad (3)$$

Ferminivån erhålls till exempel med

$$p = p_0 e^{-\mu/k_B T} \quad (4).$$

(3) och (4) ger

$$p_0 e^{-\mu/k_B T} = \sqrt{n_0 p_0} e^{-E_g/2k_B T}$$

$$\ln p_0 - \frac{1}{k_B T} \mu = \ln \sqrt{n_0 p_0} - \frac{1}{k_B T} \frac{E_g}{2}$$

$$\Leftrightarrow \mu = \frac{E_g}{2} + \frac{k_B T}{2} \underbrace{\ln \frac{p_0}{n_0}}_{= \frac{3}{2} \ln \frac{m_h}{m_e}}$$

Vid  $T = 0$  är

$$\mu = \frac{E_g}{2}.$$

Den andra termen är mycket liten vid rumstemperatur så att fermienergin fortfarande ligger nära halva bandgapet.

### Exempel Rent Si

Vid RT är

$$np = 2 \cdot 10^{31} \text{ m}^{-6}.$$

De intrinsiska (utan påverkan av föroreningsatomer) elektrontätheterna är då

$$n_i = p_i \approx 5 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-3}.$$

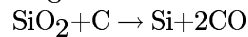
Tätheten av atomer (diamantstruktur, fcc med två atomer i basen) är

$$\frac{4 \cdot 2}{a^3} = \frac{8}{(5,43 \cdot 10^{-10} \text{ m})^3} \approx 5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}.$$

Om varje donatoratom ger en elektron till ledningsbandet behövs inte mer än en donator per  $10^{13}$  Si-atomer för att dopämnet ska bidra med lika många ledningsatomer som erhålls på grund av den termiska excitationen av valenselektronerna. Så fritt från dopämnen har man inte lyckats göra Si.

### Tillverkning

Det tillverkas en miljon ton rent kiselämne per år. Tillverkningen sker bland annat genom reduktion av kvartssand:



Detta blir tillräckligt rent för stålindustrin. För halvledarindustrin används andra metoder, såsom zonrening (tillverkning av enräkistallint kisel) och zochral-skimetoden (se en av de första föreläsningarna).

### Beräkna $n$ , $p$ och $\mu$ för donatordopad halvledare

Låt  $N_D$  vara tätheten av donatorer. Besatta donatortillstånd är  $f(E_D)N_D$  och obesatta  $(1 - f(E_D))N_D$ . Antal negativa laddningar = antal positiva laddningar.

$$n = p + (1 - f(E_D))N_D \quad (1)$$

$$n = n_0 e^{(\mu - E_g)/k_B T}; \ln n = \ln n_0 + \frac{\mu - E_g}{k_B T}$$

$$p = p_0 e^{-\mu/k_B T}; \ln p = \ln p_0 - \frac{\mu}{k_B T}$$

Vanlig uppgift: För  $E_g$ ,  $E_D$ ,  $n_0$ ,  $p_0$ ,  $N_D$ , och  $T$  givna, beräkna  $n$ ,  $p$ , och  $\mu$ ! Grafisk lösning: Rita upp termerna i (1) som funktion av  $\mu$ . Vanligen ger detta  $n \approx N_D$ .  $p$  erhålls ur diagrammet eller med

$$np = n_0 p_0 e^{-E_g/k_B T}$$

$\mu$  ökar med ökande donatortäthet (och minskande  $T$ ).

### Temperaturberoende hos $n$ och $p$

I det intrinsiska området (hög temperatur) är  $k_B T$  så stor att många av valenselektronerna hoppar över bandgapet. Bidraget från dopatomerna kan försummas. Både  $n$  och  $p$  är proportionella mot  $e^{-E_g/2k_B T}$ .

I det extrinsiska området är  $n = N_D$  konstant, medan  $p \propto e^{-E_g/k_B T}$ .

I utfrysningområdet (låg temperatur) tar sig nästan inga valenselektroner över bandgapet.  $n \propto e^{(E_g - E_D)/2k_B T}$ .

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 18, måndag 1 mars 2004

## 8. Magnetism

### Repetition

Magnetiska flödestätheten:  $\mathbf{B}$

Permeabiliteten för vacuum:  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ V s/(A m)}$

Relativa permeabiliteten:  $\mu_r$

Magnetiska fältstyrkan:  $\mathbf{H}$

Magnetiska susceptibiliteten:  $\chi$

Magnetisering:  $\mathbf{M}$

Följande samband gäller

$$\mathbf{B} = \mu_r \mu_0 \mathbf{H} = \mu_0 (1 + \chi) \mathbf{H} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})$$

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

$$\mu_r = 1 + \chi$$

- Paramagnetism:  $\chi > 0$ , men liten
- Diamagnetism:  $\chi < 0$ , liten (undantag supraledare:  $\chi = -1$ )
- Ferromagnetism:  $\chi \gg 0$ .

Magnetiskt moment,  $\mathbf{m}$ :

$$m = iA \text{ (strömmen } i \text{ i en sluten krets med arean } A)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B})$$

$$E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$

### Exempel Elektron i cirkelbana

Låt  $a$  vara cirkelbanans radie. Då ges det magnetiska momentet av

$$m = A \cdot \frac{ev}{2\pi a} = \{A = \pi a^2\} = \frac{1}{2} eva$$

Rörelsemängdsmomentet

$$L_z = Mva$$

$$\gamma_{ban} = \{\text{Gyromagnetiska kvoten}\} = \frac{\text{magnetiskt moment}}{\text{rörelsemängdsmoment}} = \frac{eva/2}{Mva} = \frac{a}{2M}$$

Rörelsemängdsmomentet är kvantiserat, kvantum  $\hbar$ , varför också magnetiska

momentet är kvantiserat, kvantum  $\hbar e/2M = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ A m}^2$ . ( $[\text{A m}^2] = \left[ \frac{\text{J}}{\text{T}} \right]$ )

Spinnet: rörelsemängdsmoment  $\frac{1}{2}\hbar$

$$\gamma_{spin} = 2\gamma_{ban}$$

Magnetska momentet blir

$$\hbar e/2M = \mu_B, \text{ bohrmagnetonen.}$$

## 8.1 Paramagnetiska ämnen

- (en del) metaller
- salter med joner av övergångsmetaller eller sällsynta jordartsmetaller
- övergångsmetallatomer inlösta i omagnetiska metaller (Cu, Al)

## 8.2 Elektrongasens paramagnetism (pauliparamagnetism) (Kittel, sid 433)

Låt  $N_{\uparrow}(E)$  och  $N_{\downarrow}(E)$  vara tillståndstätheten för tillstånd med upp- respektive nedåtriktade spin. Utan något magnetiskt fält är

$$N_{\uparrow}(E) = N_{\downarrow}(E) = N_0(E).$$

Med ett pålagt magnetiskt fält förskjuts tillståndstätheterna så att

$$N_{\uparrow}(E) = N_0(E + \mu_B \mu_0 H)$$

och

$$N_{\downarrow}(E) = N_0(E - \mu_B \mu_0 H).$$

Observera att även med ett starkt fält är

$$2\mu_B \mu_0 H \ll E_F.$$

**Exempel** Om  $\mu_0 H = B = 1 \text{ T}$  blir  $2\mu_B \mu_0 H = 2 \cdot 0,927 \cdot 10^{-23} \cdot 1 \text{ eV} \approx 10^{-4} \text{ eV}$ .

Vi har att skillnaden

$$N_{\uparrow} - N_{\downarrow} = \frac{1}{2} N(E_F) \cdot 2\mu_B \mu_0 H$$

Magnetisering

$$M = \frac{\text{magnetiskt moment}}{\text{volym}} = \frac{\mu_B(N_{\uparrow} - N_{\downarrow})}{V} = \frac{\mu_B^2 N(E_F) \mu_0 H}{V} \equiv \chi_{para} H$$

$\chi_{para} \propto N(E_F)$ , oberoende av  $T$ ! (Klassisk gas ger  $\chi_{para} \propto 1/T$ .)  $\chi_{para}$  orsakas av elektronernas spin. Elektronerna har också laddning vilket ger ett diamagnetiskt bidrag (Lentz lag).  $\chi_{tot}$  kan vara  $> 0$  eller  $< 0$  beroende på materialet, för "omagnetiska" metaller.

## 8.3 Paramagnetiska salter

Historiskt har paramagnetiska salter varit viktiga:

- Mätning av  $\chi$  gav information om grundtillståndet för jonerna (bekräftade Hund's regler).
- De har givit metoder att erhålla låga temperaturer ( $< 1 \text{ K}$ ).

**Exempel**  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

$\text{Cu}^{2+}$ -jonerna beter sig som en gas av ej växelverkande magnetiska moment. Är växelverkan liten? Avståndet mellan jonerna (och därmed de magnetiska momentens plats i rummet) är  $d = 10 \text{ \AA}$ . Typisk växelverkansenergi

$$\begin{aligned}\Delta E &= 2 \cdot \frac{\mu_0 m_1}{4\pi d^3} \cdot m_2 = \{m_1 = m_2 = \mu_B\} \\ &= \frac{2 \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot (0,927 \cdot 10^{-23})^2}{4\pi (10^{-10})^3} \approx 10^{-23} \text{ J} = 10^{-4} \text{ eV}.\end{aligned}$$

Eftersom växelverkansenergin är så liten kan den försummas.

**Exempel** Jon med  $S = \frac{1}{2}$ ,  $m = \mu_B$

Utan något pålagt magnetfält,  $\mu_0 H = 0$ , har orbitaler med spin upp och spin ned samma energi, men då  $\mu_0 H \neq 0$  sker en uppsplittring av energierna, så att skillnaden i energi är

$$\Delta E = 2\mu_B \mu_0 H$$

Låt  $N_\uparrow$  och  $N_\downarrow$  vara antal joner med spin i magnetfältets riktning respektive motsatt riktning. Då är

$$\frac{N_\uparrow}{N_\downarrow} = e^{-2\mu_B \mu_0 H / k_B T} = e^{-\alpha} \quad (1)$$

Totalt antal joner

$$N = N_\uparrow + N_\downarrow \quad (2)$$

(1) och (2) ger

$$N = N_\uparrow + N_\uparrow e^{-\alpha}$$

$$\Rightarrow N_\uparrow = \frac{N}{1+e^{-\alpha}}$$

$$\begin{aligned}M &= \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{V} \mu_B = \frac{N\mu_B}{V} \left( \frac{1}{1+e^{-\alpha}} - \frac{e^{-\alpha}}{1+e^{-\alpha}} \right) \\ &= \frac{N\mu_B}{V} \cdot \frac{1-e^{-\alpha}}{1+e^{-\alpha}} \cdot \frac{e^{-\alpha/2}}{e^{-\alpha/2}} = \frac{N\mu_B}{V} \cdot \frac{e^{\alpha/2} - e^{-\alpha/2}}{e^{\alpha/2} + e^{-\alpha/2}} = \frac{N\mu_B}{V} \cdot \tanh \frac{\alpha}{2} \\ &\Rightarrow M = \frac{N\mu_B}{V} \cdot \tanh \frac{\mu_B \mu_0 H}{k_B T}\end{aligned}$$

För normala fältstyrkor och temperaturer gäller att  $\alpha \ll 1 \Rightarrow \tanh \frac{\alpha}{2} \approx \frac{\alpha}{2}$ , så att

$$M = \frac{N\mu_B^2 \mu_0}{V k_B T} H = \chi H$$

Detta ger oss *Curies lag*

$$\chi = \frac{N\mu_B^2 \mu_0}{V k_B T} = \frac{C}{T}$$

**Allmänt** Jon med  $J, L, S$

Jonen betecknas  $^{2S+1}X_J$ , där  $X$  beror på  $L$  genom

$$\begin{array}{l} L = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad \dots \\ X = S \quad P \quad D \quad F \quad G \quad \dots \end{array}$$

$$m = g\mu_B J,$$

där landéfaktorn

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}.$$

$$E = m_J g \mu_B \mu_0 H, \quad m_J = J, J-1, \dots, -J$$

Energien är alltså uppsplittrad, beroende på  $m_J$  och  $g$ . Motsvarande beräkningar som för jon med  $S = \frac{1}{2}$  ger

$$\chi = \frac{N}{V} \frac{(p\mu_B)^2 \mu_0}{3k_B T},$$

där effektiva bohrmagnetonalet

$$p = g\sqrt{J(J+1)}.$$

## Hunds regler testas

Mätning av susceptibiliteten  $\chi$  gav möjlighet att testa Hunds regler. För grundtillstånd gäller enligt Hund:

1. Maximera  $S$  (låt så många elektroner som möjligt ha parallella spinn).
2. Maximera  $L = \sum m_l$ .
3.  $J = |L - S|$  om skalet är mindre än halvfyllt,  $J = |L + S|$  om mer än halvfyllt.

Sällsynta jordartsmetallerna: 4f-skalet fylls från Ce till Yb

**Exempel** Beräkna  $p$  för  $\text{Nd}^{3+}$  (neodym)!

Antal platser i skalet:  $\underbrace{2}_{\text{spin}} \underbrace{(2l+1)}_{\text{f-skal}} = 14$

Nd:  $4f^4 6s^2 \rightarrow \text{Nd}^{3+} : 4f^3$ .

$l$	3	2	1	0	-1	-2	-3
$m_l$	↑	↑	↑	-	-	-	-

$$S = 3 \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

$$L = 3 + 2 + 1 = 6$$

Skalet är mindre än halvfyllt, så

$$J = |L - S| = 6 - \frac{3}{2} = \frac{9}{2}$$

$$\Rightarrow g = \dots = \frac{8}{11}$$

$$\Rightarrow p = g\sqrt{J(J+1)} = \frac{12}{\sqrt{11}}$$

**Exempel**  $\text{Gd}^{3+}$

7 st 4f-elektroner

$l$	3	2	1	0	-1	-2	-3
$m_l$	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑

$$S = 7 \cdot \frac{1}{2} = \frac{7}{2}$$

$$L = 3 + 2 + 1 + 0 - 1 - 2 - 3 = 0$$

$$\Rightarrow J = S$$

$$\Rightarrow p = 3\sqrt{7}$$

Stämmer bra utom för  $\text{Sm}^{3+}$  och  $\text{Eu}^{3+}$ , vilket beror på att en högre energinivå ligger nära, så att nivåerna går in i varandra.

För salter med joner av övergångsmetalljoner stämmer vår modell inte alls. Här är  $p$  i stället givet av  $p = g\sqrt{S(S+1)}$ , det vill säga som om det orbitala momentet,  $L$ , inte fanns. Orsak: d-elektronerna ytterst i atomerna känner av det starka fältet från omgivande joner så att centralfältsapproximationen kollapsar;  $L$  och  $L_z$  är ej längre goda kvanttal. (4f-elektronerna är gömda bakom 5s-, 5p- och 5d-elektronerna.)



### Adiabatisk avmagnetisering

Paramagnetiska salter kan användas för att nå låga temperaturer. I ett  $S - T$ -diagram ligger kurvan för  $\mu_0 H \neq 0$  under den för  $\mu_0 H = 0$ , eftersom entropin blir lägre då spinnen ordnas (se Kittel, Figur 8, sid 433). Låt A vara en punkt på den övre kurvan, B punkten på den undre kurvan som ligger rakt under A, C punkten på den övre kurvan som ligger vågrätt vänster om B.

1. A→B: Lägg på ett magnetfält.  $T$  konstant, värme avges till omgivningen
2. B→C: Isolera saltet och slå av magnetfältet. Spinsystemet vill ha tillbaka energi som tas från fononerna,  $T$  minskar.

Metoden ger möjlighet att nå  $T \leq 1\text{K}$ . I dag används  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  utspädningskylare för att rutinmässigt nå 20 mK.

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 19, tisdag 2 mars 2004

(Dessa föreläsninganteckningar är en renskrivning av någon annans anteckningar, då jag inte hade möjlighet att närvara på föreläsningen.)

## 8.5 Ferromagnetism

Vid RT: Fe, Ni, Co, Gd, diverse legeringar, även icke-metaller: EuO, EuS, CuBr<sub>3</sub>. Spontant  $M$  för  $T < T_C$ ,  $T_C$  är curietemperaturen (Fe:  $T_C = 1043$  K, Ni:  $T_C = 627$  K).  $T > T_C \Rightarrow$  paramagnetiska:  $\chi \sim \frac{1}{T-T_C}$ .

$M_{max} = M(T=0)$  (se Kittel sid 448, figur 4)

$$B_{max} = 2,2 \text{ V s/m}^2$$

$$M_{max} = \frac{B_{max}}{\mu_0} \equiv \frac{\mu_{at} N_{at}}{V}$$

$$\Rightarrow \mu_{at} = \begin{cases} 2,2\mu_B & \text{för Fe} \\ 0,6\mu_B & \text{för Ni} \end{cases}$$

$M(T)$  är märkbar i andra storheter, ex  $C_V = \frac{dU}{dT}$  (vid  $T_C$  är  $C_V$  större, på grund av att energi fordras för att bryta upp spinordningen) och resistiviteten,  $\rho$ .

### Modell

Weiss modell (1907). Ej kvantmekanisk men av intresse för att den ger vägledning för bättre kvantmekaniska teorier.

1. utöver det yttre fältet  $\mathbf{H}$  finns ett *inre* fält  
 $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H} + \lambda \mathbf{M}$
2. ämnet beter sig som en paramagnet

Modellen förklarar

1.  $\chi(T)$  för  $T > T_C$ :

$$M = \underbrace{\chi_p}_{=\frac{C}{T}} (H + \lambda M)$$

$$\Rightarrow M(1 - \frac{\lambda C}{T}) = \frac{C}{T} H$$

$$\Rightarrow M = \frac{C}{T - \lambda C} H$$

$$\Rightarrow \chi = \frac{C}{T - T_C}$$

2.  $M \neq 0$  för  $T < T_C$  och  $H = 0$ :

Antag för enkelhets skull att varje atom har ett spin

$$\Rightarrow M = \frac{N\mu_B}{V} \tanh \frac{\mu_B \mu_0 H}{k_B T}$$

Enligt modellen övergår  $H$  till  $H + \lambda M$ . Vi vill undersöka om vi kan få  $M \neq 0$  då  $H \rightarrow 0$ .

$$H \rightarrow 0 \Rightarrow M = \frac{N\mu_B}{V} \tanh \underbrace{\frac{\mu_B \mu_0 \lambda M}{k_B T}}_{=x}$$

$$\Rightarrow \text{HL} = \frac{N\mu_B}{V} \tanh x, \text{VL} = x \frac{k_B T}{\mu_B \mu_0 \lambda} \propto T$$

$$\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \rightarrow \begin{cases} 1 & , x \gg 1 \\ x & , x \ll 1 \end{cases}$$

Plotta VL (för olika  $T$ ) och HL som funktioner av  $x$ ! För  $T > T_C$  saknas lösning. För  $T < T_C$  är lösningen skärningen mellan kurvorna och de ger  $M \neq 0$  som växer med minskande  $T$ . Problemet är att det inre fältet är mycket större än vad man kan förklara med dipol-dipol-växelverkan ( $10^4$  gånger större).

**Kvantmekanik:** Ferromagnetism har sitt ursprung i pauliprincipen. Den kräver att  $\Psi$  är antisymmetrisk med avseende på utbyte av varje par av elektroner. Det betyder att två elektroner med samma spin inte samtidigt kan befinna sig i samma punkt i rummet.

### Exempel H<sub>2</sub>-molekylen

Låt  $a(1)$  vara vågfunktionen för elektron 1 runt kärna a,  $b(2)$  vågfunktionen för elektron 2 runt kärna b.

$$\Psi_+ = a(1)b(2) + a(2)b(1), \text{symmetrisk; } \chi^{\text{spin}} \text{ antisymmetrisk, } S = 0$$

$$\Psi_- = a(1)b(2) - a(2)b(1), \text{antisymmetrisk; } \chi^{\text{spin}} \text{ symmetrisk, } S = 1$$

Energier

$$U_1 = +\frac{e^2}{r_{12}} \text{ (elektron-elektron)}$$

$$U_2 = -\frac{e^2}{r_{1b}} \text{ (elektron-kärna)}$$

$$U_3 = -\frac{e^2}{r_{2a}} \text{ (elektron-kärna)}$$

...

$$E = \int U |\Psi|^2 dV,$$

$$|\Psi|^2 = a(1)^2 b(2)^2 + a(2)^2 b(1)^2 \pm 2a(1)b(2)a(2)b(1)$$

$$E = C \pm A, + \Rightarrow S = 0, - \Rightarrow S = 1. A < 0 \Rightarrow S = 0$$

### Heisenberg (1928)

Hamiltonoperatorm

$$\hat{H} = \dots - 2J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

där utbytesintegralen  $J > 0$  för ferromagnetiska ämnen. Eftersom överlappet  $\Psi_{3d} - \Psi_{3d}$  är stort endast för närmaste grannar så gäller för en atom,  $i$ , att

$$E_i = \dots - 2J \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_{i-1} + \mathbf{S}_{i+1})$$

Med

$$\vec{\mu}_i = g\mu_B \mathbf{S}_i$$

fås

$$E_i = \dots - \frac{2J}{g\mu_B} \vec{\mu}_i \cdot (\mathbf{S}_{i-1} + \mathbf{S}_{i+1})$$

De omgivande atomernas magnetiska moment skapar ett "inre fält", det vill säga kvantmekaniken förklarar uppkomsten av det inre fältet.

## 8.6 Magnonen (spinvågor)

Är det så här? Vid  $T = 0$  alla spin likriktade, vid  $T > 0$  något spin motriktat:

$$\Delta E = +4JS^2 - (-4JS^2) = 8JS^2$$

Sannolikheten

$$e^{-\Delta E/k_B T}$$

$$\Rightarrow M(0) - M(T) \propto e^{-\Delta E/k_B T},$$

men detta stämmer *inte!*

Metaller hittar ett mindre energikrävande sätt att minska magnetiseringen i spinvågor (kvantiserade spinvågor kallas magnoner i analogi med fotoner, fononer, ...) Alla spin bidrar,

$$\mathbf{T} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} = \vec{\mu}_i \times \mathbf{B}_i = \frac{d}{dt} \mathbf{B}_i$$

Ansätt vågor som för fononer

$$\Rightarrow \omega = 4JS^2(1 - \cos ka)$$

Detta ger för små  $k$  att  $\omega \propto k^2$  (jämför fononer,  $\omega \propto k$ ).

$$\Rightarrow N(\omega) \propto \sqrt{\omega}$$

$$N(\omega)d\omega = k^2 dk$$

$$M(0) - M(T) = \frac{\text{antal magnoner} \cdot \mu_B}{V}$$

Magnonen lyder Bose-Einstein-statistik, så vid låga temperaturer är antalet magnoner

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{\omega}}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega$$

$$\therefore M(0) - M(T) \propto T^{\frac{3}{2}}$$

Detta stämmer bra med experiment, vilket tyder på att spinvågor finns! ( $\omega(k)$  kan mätas med hjälp av neutroner som har ett magnetiskt moment.)

## 8.7 Domäner

En enkristall av Fe delar spontant upp sig i domäner för att minimera energin. Resultatet är inget (eller litet) fält utanför kristallen. Blockvägg (vägg mellan två domäner), schematiskt:

$$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow,$$

kostar energin

$$\Delta E = E_{\uparrow\downarrow} - E_{\uparrow\uparrow} = 4JS^2.$$

Bättre vore att ha en successiv övergång över  $N$  atomer. Energikostnaden för varje spinskillnad

$$\Delta E = -2JS^2 \cos \frac{\pi}{N} - (-2JS^2) = 2JS^2 \underbrace{\left(1 - \cos \frac{\pi}{N}\right)}_{\sim \frac{1}{2} \frac{\pi^2}{N^2}} \propto \frac{1}{N^2}$$

Total energikostnad blir

$$N \cdot \frac{JS^2 \pi^2}{N^2} \propto \frac{1}{N}$$

Detta motiveras av att kristallen föredrar att ha  $M$  i vissa riktningar.

- Fe:  $M$  helst i [100]-riktning
- Ni: [111]-riktning
- Co: c-riktning (hcp)

Energien för domänvägg:

$$E_{tot} = \frac{\pi^2 JS^2}{N} + KN,$$

där den andra termen kommer av att nästan alla spin är felriktade i väggen.

Minimera:

$$\frac{dE_{tot}}{dN} = 0$$

leder till att  $N \sim$  några hundra. När  $H$  är litet växer de domäner som har  $\mathbf{M} \parallel \mathbf{H}$ .

# Fasta tillståndets fysik

Föreläsning 20, torsdag 4 mars 2004

## 9. Supraledning

### 9.1 Upptäckter

1911: Kamerling Onnes upptäckte att resistiviteten för Hg,  $\rho_{Hg} = 0$  för  $T < T_c = 4,2$  K, det vill säga inget ledningsmotstånd. Många metaller är supraledande. Högsta uppmätta  $T_c$  var länge 23,2 K (för Nb<sub>3</sub>Ge), för metaller var den 9 K (Nb). Dåligt ledande metaller har ofta hög  $T_c$ .

1986: Nytt skede (plan av kopparoxid viktiga):

- La<sub>2-x</sub>Ba<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>, Bednaz-Müller,  $T_c = 35$  K;
- YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> för  $x = 0,36$  blir  $T_c = 92$  K;
- MgBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8+δ</sub>,  $T_c = 135$  K vid normalt tryck, 160 K vid högt tryck (rekord i dag).

1990: C<sub>60</sub> i fcc-struktur:

- K<sub>3</sub>C<sub>60</sub>  $\Rightarrow T_c = 19$  K
- Rb<sub>x</sub>Tl<sub>y</sub>C<sub>60</sub>  $\Rightarrow T_c = 42$  K

### 9.2 Meissnereffekten (1933)

Inne i en supraledare är  $\mathbf{B} = 0$ . Magnetfält kröks runt supraledaren. Denna effekt kallas meissnereffekten och ledde till Londons postulat (1935), som var ett mycket viktigt steg på vägen mot en fullständig förståelse och fullgod teoretisk beskrivning, 1957.

Londons startpunkt: Tvåvätskemodellen (Casimir, Gorton). Det finns två slags valenselektroner, normala och supraledande. Om  $n_s$  är tätheten av supraledande elektroner är totala tätheten

$$\begin{aligned} n &= n_s + n_{normala} \\ n_s &\rightarrow 0, \text{ då } T \rightarrow T_c \\ \begin{cases} m \frac{d}{dt} \mathbf{v}_s = -e\mathbf{E} \\ \mathbf{J} = n_s(-e)\mathbf{v}_s \end{cases} \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \mathbf{J} &= -n_s e \frac{d}{dt} \mathbf{v}_s = + \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{E} \quad (1) \end{aligned}$$

Maxwell:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}$$

$$\Rightarrow \nabla \times \frac{d}{dt} \mathbf{J} = -\frac{n_s e^2}{m} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \times \mathbf{J} + \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{B} \right) = 0$$

Londons postulat: Försök med

$$\nabla \times \mathbf{J} + \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{B} = 0 \quad (2)$$

Detta kan ses som Ohms lag för supraledare. Skrivs ofta som

$$\mathbf{J} = -\frac{n_s e^2}{m} \mathbf{A}, \quad \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} \quad (\text{Ohms lag: } \mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}).$$

(Observera att  $\mathbf{A}$  är en potential, medan  $\mathbf{E}$  är en fältstyrka.) Kombinera (2) med Maxwells

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} \quad (3)$$

så fås

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{B} + \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{B} = 0$$

Men

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}$$

$$= \nabla \cdot \nabla \times \mathbf{A} = 0$$

och vi får kvar

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B}, \quad \frac{1}{\lambda_L^2} = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m}$$

$$\Rightarrow B(x) = B(0) e^{-x/\lambda_L}$$

$\lambda_L$  är inträngningsdjupet för ett magnetfält och förutsäger ett visst inträngningsdjup, 100 - 1000 Å, som bekräftades av experiment på tunna filmer.

### 9.3 Starka magnetfält

Vid magnetfält  $H > H_c$  försvinner supraledningen. Detsamma gäller för strömmar  $I > I_c$  och vid förekomsten av magnetiska föroreningar. "Supraledning och magnetism går inte ihop." Det finns två typer av supraledare (minns att  $M = \chi H$ ) (se Kittel sid 340, figur 4):

Typ I:  $\chi = -1$  i intervallet  $0 \leq H < H_c$

Typ II:  $\chi = -1$  i intervallet  $0 \leq H < H_{c1}$ , där  $H_{c1}$  i regel är mindre än  $H_c$  för typ I-supraledare. I detta intervall fås en fullständig meissnereffekt.  $|M|$  avtar (exponentiellt?) med  $H$  i intervallet  $H_{c1} \leq H < H_{c2}$ , där  $H_{c2}$  i regel är större än  $H_c$  för typ I-supraledare. Här fås shubnikov-effekt (partiell meissnereffekt), normalt ledande trådar uppstår där fältet tränger in.

### 9.4 Energigap runt $E_F$

(Dessa energigap har inte att göra med stående vågor, ej zongrängs-gap.) Visas av

1.  $C_V \propto e^{-\Delta E/k_B T}$  för supraledare (upp till  $T_c$ )
2. Tunnelström (Ivar Giæver 1960, efter BCS (se nedan))

Mot en bit supraledande aluminium (S) med ett isolerande Al-oxidskikt (I) ( $d = 20 - 30$  Å, fungerar som en tunnlingsbarriär) läggs en normalt ledande metall (N). Över dessa läggs en spänning,  $V$ . Om det supraledande materialet har ett bandgap,  $2\Delta$ , kring fermivån fås en ström genom oxidskiktet först vid  $V = \frac{\Delta}{e}$ . Detta var en S-I-N-övergång. Man kan

även mäta på S-I-S-övergångar. Då fås en liten ström mellan för spänningar mellan  $\frac{\Delta_1 - \Delta_2}{e}$  och  $\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{e}$  och därefter en större ström, som för S-I-N-övergång.

3. Optiska mätningar: (IR-området) Mer transmission om  $\hbar\omega < \Delta$ .

Resultatet är att det finns ett bandgap för temperaturer mellan 0 och  $T_c$ . Bandgapet,  $2\Delta$ , är av storleksordning några  $k_B T_c$ .

## 9.5 Isotopeffekt (1950)

Experiment visar att

$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M_{atom}}}$$

vilket tyder på att fononer är inblandade.

## 9.6 Teoretisk modell (1957, BCS-teorin)

Cooper: Om man kan hitta en mekanism som medför *attraktiv* växelverkan mellan elektroner nära  $E_F$  så gör det att löst bundna *par* av elektroner med summan  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_1 = 0$  och spin motriktade bildas (så kallade copperpar).

Robert Schrieffer: Indirekt växelverkan via fonon:

Elektron A rör sig genom kristallen  $\Rightarrow$  jonerna i närheten dras till spåret. Elektron B känner ändringen av lägena och tenderar att följa spåret och elektron A. Gitterdistortionen är störst en tid efter att A har passerat  $\Rightarrow$  relativt stort avstånd mellan A och B  $\Rightarrow \Psi_{par}$  har stor utsträckning i rummet.

Ett kondensat bildas av elektronpar där  $|E - E_F| \leq \hbar\omega_D$ , ( $\omega_D$  debyefrekvensen) det vill säga totalt  $N(E_F) \cdot \hbar\omega_D \sim 10^{-3}$  elektroner per atom är inblandade.

BCS förutsäger / förklarar

1.  $T_c = \Theta_D e^{-\frac{1}{VN(E_F)}}$ ,  $V$  är effektiva elektron-fonon-kopplingen. (Obs! Störningsteori duger ej,  $V$  liten, i nämnaren)
2. Kondensationsenergin  $W = -\frac{1}{2}N(E_F)\Delta^2$
3.  $2\Delta = 3,5k_B T_c$
4. Londons postulat