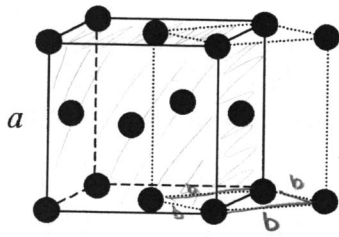
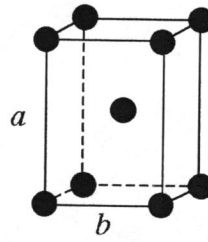


S4.

**fcc-strukturen:**  
Kubisk enhetscell



Alternativ tetragonal cell



$$\frac{1}{4} \sqrt{2} a = b$$

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

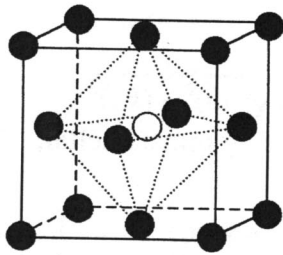
$$a = \sqrt{2} b$$

4 gitterpunkter per cell  
 hörn delas med 8 celler  $(8 \times \frac{1}{8}) = 1$   
 sida delas med 2  $(6 \times \frac{1}{2}) = 3$  } 4

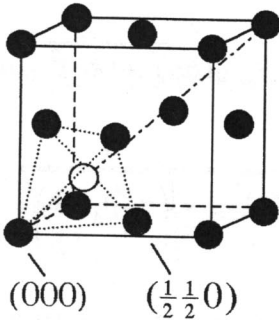
2 gitterpunkter per cell den i mitten är endast för cellen  
 $a = \sqrt{2} b$  hörnen är  $\frac{1}{8} \Rightarrow 2$

S5.

**Mellanlägesplatser i fcc-struktur:**



Oktaedrisk position i centrum av samma omgivning kuben  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ , samt ekvivalenta till  $\forall$  pkt  $\Rightarrow$  positioner mitt på kubkanterna  $\exists 4$  "platser" i kuben  $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ ,  $(0, \frac{1}{2}, 0)$  och  $(0, 0, \frac{1}{2})$ . de resterande kan ges utifrån oavstående mha gittertranslation.



Tetraedrisk position utmed kubdiagonalen med koordinater  $(t, t, t)$ .

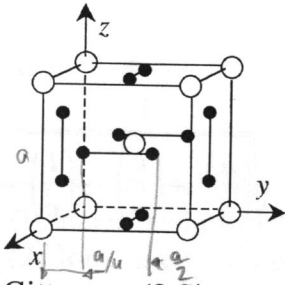
Den insatta atomen skall ha samma avstånd till de fyra grannatomerna, dvs

$$\sqrt{3}t = \sqrt{(\frac{1}{2}-t)^2 + (\frac{1}{2}-t)^2 + t^2} \Rightarrow t = \frac{1}{4}$$

Positionen är alltså en fjärdedels kubdiagonal från hörnet.

S6.

**V<sub>3</sub>Si (A15-struktur, av intresse pga supraledning)**



Si (vita i figuren): 2 per cell  
 V (svarta i figuren): 6 per cell  
 (bildar endimensionella kedjor med period  $a/2$ )

ej fcc, bcc  
 $\Rightarrow$  sc med

Gitter: sc, (2 Si och 6 V i basen), kantlängd  $a$

Lämpligt val av bas (ej unikt!):

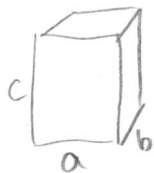
Si: en hörnatom (den i origo) + centrumatomen

V: de tre atomparen på siorna närmast origo

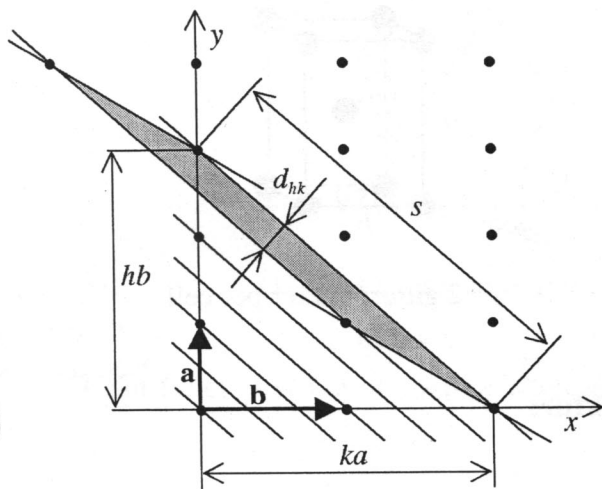
$$\left\{ \begin{array}{l} (0, 0, 0) \quad (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), (0, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}) \\ (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}), (\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}) \\ (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 0), (\frac{3}{4}, \frac{1}{2}, 0) \end{array} \right.$$

S7. Tvådimensionellt "ortorombiskt" gitter:  $a \neq b$

ortorombiskt



$a \neq b \neq c$   
(kubiskt om  $a=b=c$ )



Studera planet (linjen) som skär axlarna i  $ka$  och  $hb$ :  
( $h = 3$  och  $k = 2$  i detta fall)

Millerindex:  
 $(kh) \Rightarrow (\frac{1}{k} \frac{1}{h}) \Rightarrow (hk)$

Planet tillhör planskaran med Millerindex  $(hk)$   
(förutsatt att  $h$  och  $k$  saknar gemensam heltalsfaktor).

Avstånd mellan punkter på samma plan:  $s = \sqrt{(hb)^2 + (ka)^2}$   
[Om det finns punkter på kortare avstånd är  $(hk)$  ej minsta heltal, dvs ej Millerindex!]

Det skuggade området är en primitiv cell med arean  $d_{hk}s = d_{hk}\sqrt{(hb)^2 + (ka)^2}$ .

Men alla primitiva celler har samma area!  $\Rightarrow d_{hk}\sqrt{(hb)^2 + (ka)^2} = ab$

$$\Leftrightarrow d_{hk} = \frac{ab}{\sqrt{(hb)^2 + (ka)^2}} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2}}$$

Specialfall: Kvadratisk gitter ( $a = b$ )

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

Generalisering till tredimensionella gitter:

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

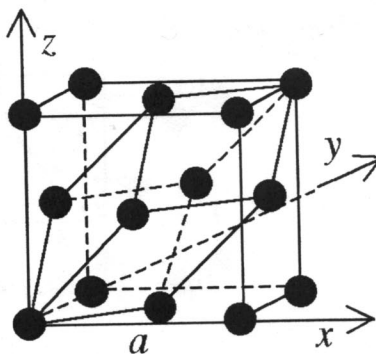
Kubiskt: 
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

S8

### fcc-strukturen

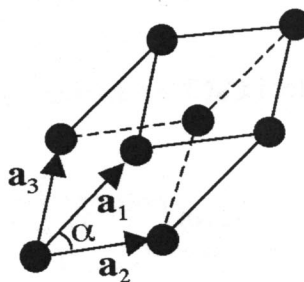
Kubisk enhetscell:

$$V_1 = a^3$$



Primitiv enhetscell (ej unik!):

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



$$V_2 = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \det \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} + \frac{a^3}{8} = \frac{a^3}{4} = \frac{1}{4} V_1$$

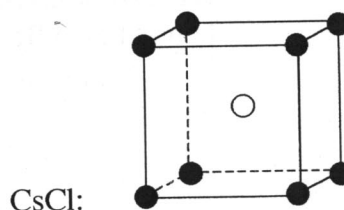
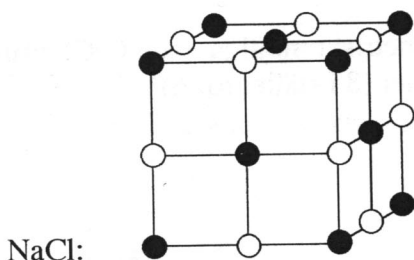
Den primitiva cellen begränsas av romber med

$$\alpha = \arccos \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1|^2} = \arccos \frac{1}{2} = 60^\circ$$

Romboedrisk gitter med annat värde på  $\alpha$  saknar fcc-gittrets kubiska symmetri!

S12.

### Kristallstrukturer hos alkalihalider



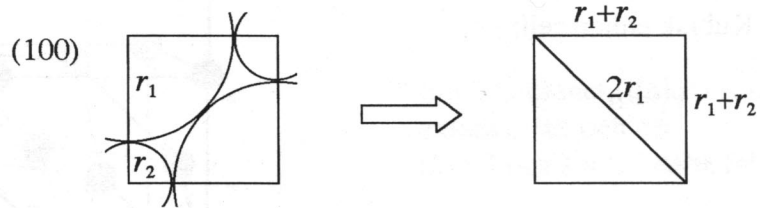
Önskvärt för stabilitet:

- (1) Joner med motsatt laddning i kontakt
- (2) Joner med samma laddning ej i kontakt

Om skillnaden i jonradie är för stor kan inte villkoren (1) och (2) uppfyllas samtidigt!

Jonradier [Å]	
Na <sup>+</sup>	0,95
Cs <sup>+</sup>	1,69
Cl <sup>-</sup>	1,81

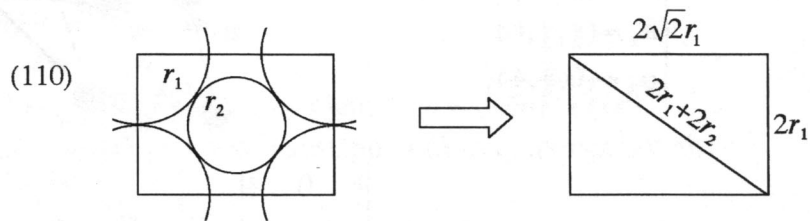
Gränsfallet i NaCl-strukturen ( $r_1$  förutsätts vara den större jonradien):



$$2r_1 = \sqrt{2}(r_1 + r_2) \Rightarrow \frac{r_2}{r_1} = \sqrt{2} - 1 \approx 0,41$$

(1) och (2) kan uppfyllas om  $\frac{r_2}{r_1} > \sqrt{2} - 1 \approx 0,41$

Gränsfallet i CsCl-strukturen ( $r_1$  förutsätts vara den större jonradien):



$$(2r_1 + 2r_2)^2 = 8r_1^2 + 2r_2^2 \Rightarrow \frac{r_2}{r_1} = \sqrt{3} - 1 \approx 0,73$$

(1) och (2) kan uppfyllas om  $\frac{r_2}{r_1} > \sqrt{3} - 1 \approx 0,73$

NaCl:  $\frac{r_2}{r_1} = \frac{r_{Na^+}}{r_{Cl^-}} = \frac{0,95}{1,81} \approx 0,52$

Endast NaCl-strukturen är geometriskt möjlig!

CsCl:  $\frac{r_2}{r_1} = \frac{r_{Cs^+}}{r_{Cl^-}} = \frac{1,69}{1,81} \approx 0,93$

Båda strukturerna är geometriskt möjliga, men CsCl-strukturen ger kontakt med fler grannjoner (8 i stället för 6)!

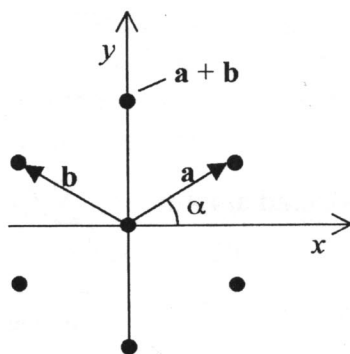


D2.

**Hexagonalt gitter (med parametrar  $a$  och  $c$ ):**

Reella rummet:

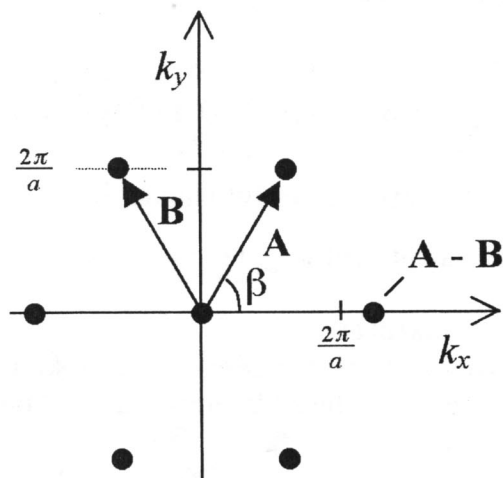
$$\begin{cases} \mathbf{a} = \frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{y} \\ \mathbf{b} = -\frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{x} + \frac{a}{2} \hat{y} \\ \mathbf{c} = c \hat{z} \end{cases}$$



$$\begin{aligned} |\mathbf{a}| &= |\mathbf{b}| = a \\ |\mathbf{c}| &= c \\ \alpha &= \arctan \frac{1}{\sqrt{3}} = 30^\circ \end{aligned}$$

Reciproka rummet:

$$\begin{cases} \mathbf{A} = \frac{2\pi \mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \dots = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \hat{x} + \frac{2\pi}{a} \hat{y} \\ \mathbf{B} = \frac{2\pi \mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})} = \dots = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \hat{x} + \frac{2\pi}{a} \hat{y} \\ \mathbf{C} = \frac{2\pi \mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \dots = \frac{2\pi}{c} \hat{z} \end{cases}$$



$$\begin{aligned} |\mathbf{A}| &= |\mathbf{B}| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \\ |\mathbf{C}| &= \frac{2\pi}{c} \end{aligned}$$

$$\beta = \arctan \sqrt{3} = 60^\circ$$

Detta är ett hexagonalt gitter med parametrar  $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$  och  $\frac{2\pi}{c}$ , roterat  $30^\circ$  relativt reella rummet

**Alternativ metod:**

- Utnyttja att (1)  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = 2\pi$   
 (2)  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = 0$   
 (3)  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = 0$

(2) & (3) innebär att  $\mathbf{A}$  är vinkelrät mot  $\mathbf{b}$  och  $\mathbf{c}$ , vilket ger riktningen på  $\mathbf{A}$ .

(1)  $\Rightarrow |\mathbf{A}| = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}| \cos \gamma}$ , där  $\gamma$  är vinkeln mellan  $\mathbf{A}$  och  $\mathbf{a}$ .

I detta fall är  $\gamma = 30^\circ$ , och vi får att  $|\mathbf{A}| = \frac{2\pi}{a \cos 30^\circ} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$

Storlek och riktning på  $\mathbf{B}$  och  $\mathbf{C}$  fås på samma sätt.

D8.

Atompositioner:

$$\mathbf{R}_{mnpj} = \underbrace{ma + nb + pc}_{\mathbf{R}_{mnp}} + \underbrace{\mathbf{R}_j}_{\text{bas}}$$

gittervektor

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

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

reciprok gittervektor

$$\text{Diffrakterad amplitud} \propto \left( \sum_j f_j e^{-i\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \right) \times \left( \sum_{mnp} e^{-i\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{mnp}} \right)$$

Strukturfaktor

Gittersumma

NaCl-struktur:

fcc med bas A: (0,0,0), B: (1/2, 0, 0)

Förväntade Braggreflexer: (111), (200), (220), (311) etc  
(alla hkl udda eller alla jämna)

Strukturfaktorn:

$$S_{hkl} = \sum_j f_j e^{i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)}$$

Summation över atomerna i basen, med koordinater  $(u_j, v_j, w_j)$  m a p cellens basvektorer.

$$S_{hkl} = f_A e^{i2\pi \cdot 0} + f_B e^{i2\pi \cdot h/2} = f_A + f_B (-1)^h$$

KBr:

$$f_{K^+} \neq f_{Br^-} \Rightarrow S_{hkl} \neq 0 \quad \text{olika formfaktorer tar inte ut varandra}$$

KCl:

$$f_{K^+} \approx f_{Cl^-} \Rightarrow S_{hkl} \approx f[1 + (-1)^h] = 0 \quad \text{om } h \text{ är udda}$$

$\Rightarrow$  Braggreflexer endast för jämna hkl

(Ekvivalent med sc-gitter med parameter a/2)

D10.

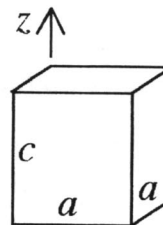
### Övergångar mellan olika kristallstrukturer

Om en Braggreflex splittras upp tyder detta på övergång till en struktur med lägre symmetri. Betrakta en övergång från kubisk till tetragonal struktur:

Tetragonal enhetscell:

$$d_{400} = d_{040} = \frac{a}{4}$$

$$d_{004} = \frac{c}{4}$$



Diffraktionvillkor enligt Bragg:

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

För en kubisk struktur blir  $\theta$  samma för reflexerna (400), (040) och (004).

För den tetragonala strukturen får reflexerna (400) och (040) vinkeln  $\theta_1$ , medan reflexen (004) får en avvikande vinkel  $\theta_2$ .

Den slumpmässiga orienteringen av kristallerna vid pulverdiffraktion innebär att man ser alla tillåtna reflexer. Eftersom dubbelt så många plan ger reflexer med vinkeln  $\theta_1$ , kommer intensiteten vid denna vinkel att vara dubbelt så stor som vid  $\theta_2$ . Såväl splittringen som intensitetsförhållandet kan alltså förklaras av en övergång från kubisk till tetragonal struktur.

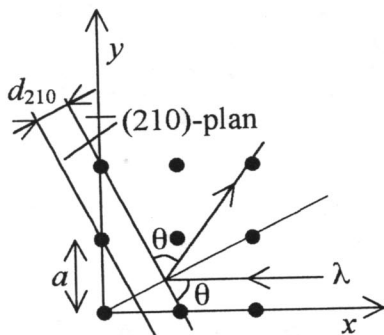
Siffervärden:  $\lambda = 1,932 \text{ \AA}$ ;  $2\theta_1 = 163,38^\circ$ ;  $2\theta_2 = 161,48^\circ$   
 (Obs! Diffractionsvinkeln =  $2\theta$ )

Braggvillkoret ger:  $2 \frac{a}{4} \sin \theta_1 = \lambda \Rightarrow a = \frac{2\lambda}{\sin \theta_1} = 3,905 \text{ \AA}$

På samma sätt:  $c = \frac{2\lambda}{\sin \theta_2} \Rightarrow \frac{c}{a} = \frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = 1.0026$

### D14. Diffraction i enkristall

I reella rummet:

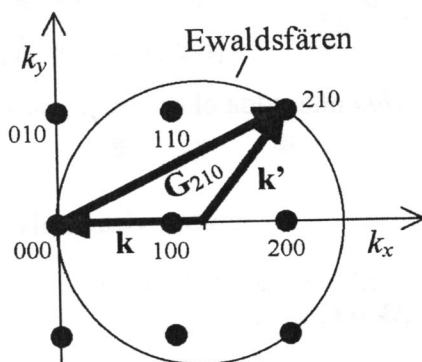


Diffractionsvillkor enligt Bragg:

$$2d_{210} \sin \theta = \lambda \quad (1:a \text{ ordningen})$$

$$d_{210} = \frac{a}{\sqrt{2^2 + 1^2 + 0^2}} = \frac{a}{5}$$

I reciproka rummet:



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

Diffractionsvillkor enligt Laue:

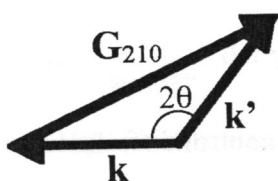
$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}_{210}$$

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

*vektor för infallande stråle*

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

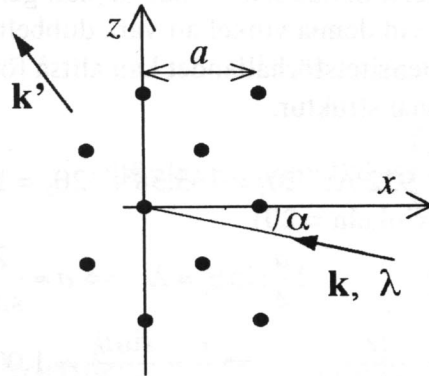
$$\mathbf{k}' = \underbrace{\frac{2\pi}{\lambda}(-1, 0, 0)}_{|\mathbf{k}|} + \underbrace{\frac{2\pi}{a}(2, 1, 0)}_{\mathbf{G}_{210}}$$



D16.

**Diffraction i aluminiumkristall**

(010)-planet:

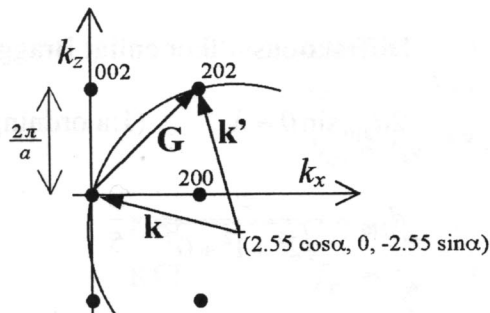


fcc-struktur  
 $a = 4,04 \text{ \AA}$   
 $\alpha = 11,31^\circ$   
 $\lambda = 1,585 \text{ \AA}$

Diffractionsvillkor:  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$

Reciproka rummet:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{a}{\lambda} = \frac{2\pi}{a} \cdot 2,55$$



Reciprok gitterpunkt på Ewaldsfärens yta: 202

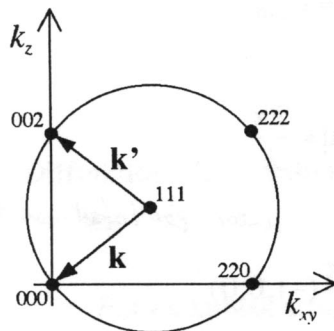
D23.

**Elektronendiffraktion:** Elektroner infaller vinkelrätt mot Cu(111)-yta.

[fcc,  $a = 3,60 \text{ \AA}$ ]

Reciproka rummet:  $\mathbf{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$  ( $hkl$  alla udda eller alla jämna)

Vid tredimensionell diffraction:



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

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{3}$$

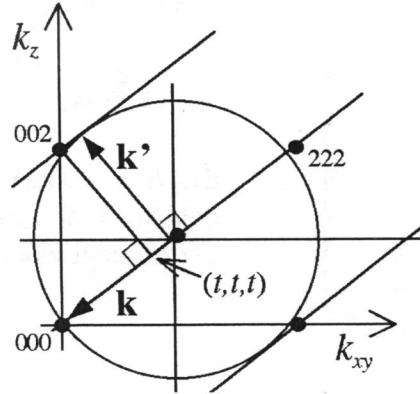
Denna konstruktion är giltig för röntgen- och neutrondiffraction.

Elektrondiffraktion mot yta: Elektronerna tränger endast in några få atomlager.

⇒ Interferensen mellan olika atomlager blir ofullständig.

⇒ Tvådimensionell diffraktion:  $\Delta \mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{G}_{\parallel}$  (komponenter parallella med ytan)

Ewaldkonstruktion: reciproka gitterpunkter dras ut till linjer  $\perp$  mot ytan.



$$\mathbf{k}' = \frac{2\pi}{a}(-t, -t, 2-t)$$

$$\mathbf{k}' \perp \mathbf{G}_{111} \Rightarrow -t - t + 2 - t = 0 \Leftrightarrow t = \frac{2}{3}$$

$$\Rightarrow \mathbf{k}' = \frac{2\pi}{a} \left( -\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, \frac{4}{3} \right)$$

$$\Rightarrow k_{\min} = |\mathbf{k}'| = \sqrt{\frac{32}{3}} \cdot \frac{\pi}{a}$$

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2 k_{\min}^2}{2m} = \frac{4\hbar^2}{3a^2 m} = \underline{31.0 \text{ eV}}$$

P2.

**Självdiffusion i koppar:**

$$E_m = 0.8 \text{ eV} = 1.28 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$D_{s1} = 3.43 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s} \text{ vid } T_1 = 700 \text{ K}$$

$$D_{s2} = 1.65 \times 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s} \text{ vid } T_2 = 1000 \text{ K}$$

Självdiffusion:  $D_s(T) \propto e^{-\frac{E_v + E_m}{k_B T}}$  ( $E_v =$  vakansenergi;  
 $E_m =$  migrationsenergi)

$$\Rightarrow \begin{cases} D_{s1} = A e^{-\frac{E_v + E_m}{k_B T_1}} \\ D_{s2} = A e^{-\frac{E_v + E_m}{k_B T_2}} \end{cases} \Rightarrow \frac{D_{s2}}{D_{s1}} = e^{-\frac{E_v + E_m}{k_B} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)}$$

$$\Leftrightarrow E_v = k_B \frac{\ln \frac{D_{s2}}{D_{s1}}}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} - E_m = \underline{1.45 \times 10^{-19} \text{ J}} (= 0.9 \text{ eV})$$

Vakanskoncentration:  $e^{-\frac{E_v}{k_B T}}$

(starkt temperaturberoende)

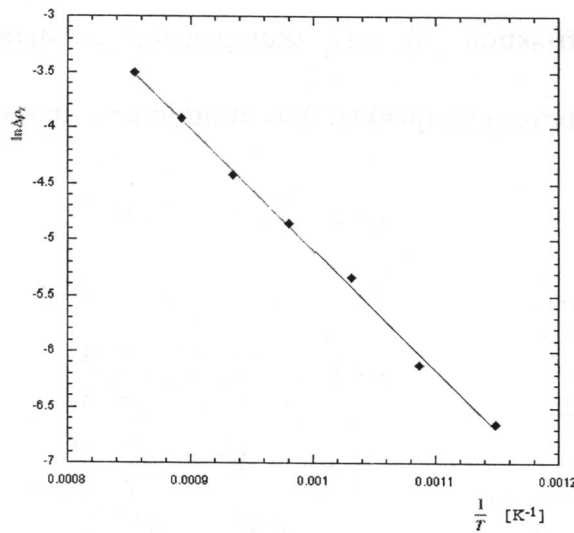
P3.

**"Quenching"**

Vid hög temperatur bestäms vakanskoncentrationen av den termiska jämvikten. Vid hastig nedkylning bevaras vakanserna, vilket ger ett extra bidrag till resistiviteten vid låg temperatur.

$$\Delta \rho_T = C e^{-\frac{E_v}{k_B T}} \Rightarrow \ln \Delta \rho_T = \ln C - \frac{E_v}{k_B T}$$

Plotta  $\ln \Delta \rho_T$  som funktion av  $\frac{1}{T}$ :



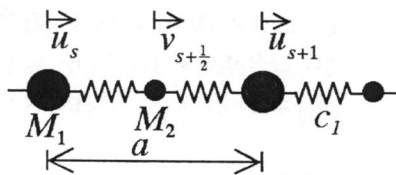
Rät linje med lutning  $-\frac{E_v}{k_B}$

Anpassning ger:

$$\Delta \rho_T = 3,34 e^{\frac{0,94 \text{ eV}}{k_B T}} \mu\Omega\text{cm}$$

dvs  $E_v = 0.94 \text{ eV}$ ,  
och  $\Delta \rho_T$  är  $3,34 \mu\Omega\text{cm}$   
per procent vakanser

### V1. Två-atomig linjär kedja:



Rörelseekvationer:

$$\begin{cases} M_1 \ddot{u}_s = c_1 (v_{s+\frac{1}{2}} + v_{s-\frac{1}{2}} - 2u_s) \\ M_2 \ddot{v}_{s+\frac{1}{2}} = c_1 (u_{s+1} + u_s - 2v_{s+\frac{1}{2}}) \end{cases}$$

Ansats:

$$\begin{cases} u_s = u e^{i(ksa - \omega t)} \\ v_{s+\frac{1}{2}} = v e^{i[k(s+\frac{1}{2}) - \omega t]} \end{cases}$$

Insättning ger:

$$\begin{cases} -\omega^2 M_1 u = c_1 (v e^{\frac{ika}{2}} + v e^{-\frac{ika}{2}} - 2u) \\ -\omega^2 M_2 v = c_1 (u e^{\frac{ika}{2}} + u e^{-\frac{ika}{2}} - 2v) \end{cases}$$

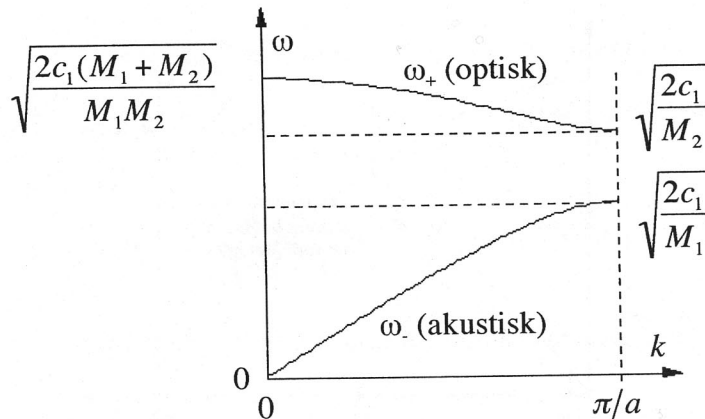
$$\Leftrightarrow \begin{cases} (\omega^2 M_1 - 2c_1)u + 2c_1 \left( \cos \frac{ka}{2} \right) v = 0 & (*) \\ 2c_1 \left( \cos \frac{ka}{2} \right) u + (\omega^2 M_2 - 2c_1)v = 0 & (**) \end{cases}$$

Ekvationssystemet har icke-triviala lösningar om

$$(\omega^2 M_1 - 2c_1)(\omega^2 M_2 - 2c_1) - 4 \cos^2 \frac{ka}{2} = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow M_1 M_2 \omega^4 - 2c_1(M_1 + M_2)\omega^2 + 4c_1 \underbrace{(1 - \cos^2 \frac{ka}{2})}_{\sin^2 \frac{ka}{2}} = 0$$

$$\Rightarrow \omega^2 = c_1 \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \pm \sqrt{c_1^2 \left( \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right)^2 - \frac{4c_1^2}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{ka}{2}}$$



Optisk mod:

$$(*) \Rightarrow \frac{u}{v} = \frac{\cos \frac{ka}{2}}{1 - \frac{\omega^2 M_1}{2c_1}}$$

$$|k| < \frac{\pi}{a} \Rightarrow \cos \frac{ka}{2} > 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{u}{v} < 0$$

(zongränsen undantagen)

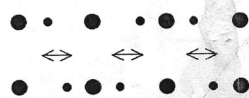
$$\omega^2 > \frac{2c_1}{M_1} \Rightarrow 1 - \frac{\omega^2 M_1}{2c_1} < 0$$

$\therefore M_1 \text{ och } M_2 \text{ rör sig i motsatta riktningar!}$

På zongränsen:

$$k = \frac{\pi}{a} \Rightarrow \begin{cases} u_s = -u_{s+1} \\ v_{s-\frac{1}{2}} = -v_{s+\frac{1}{2}} \end{cases}$$

Optisk mod: (\*)  $\Rightarrow u = 0$



De mindre atomerna svänger som harmoniska oscillatorer med  $\omega_0 = \sqrt{2c_1/M_2}$ .

Akustisk mod: (\*\*\*)  $\Rightarrow v = 0$

De större atomerna svänger som harmoniska oscillatorer med  $\omega_0 = \sqrt{2c_1/M_1}$ .

Antal moder med  $\omega$  i intervallet  $[\omega, \omega+d\omega]$  och  $k \geq 0$ :

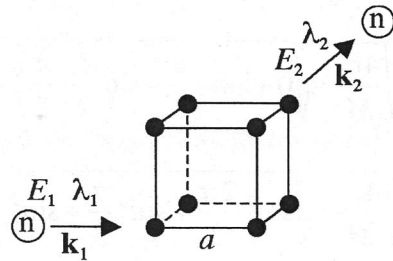
↙ Pga lika många moder med  $k \leq 0$

$$\frac{1}{2} N(\omega) d\omega = \frac{dk}{\Delta k} \Rightarrow N(\omega) = \frac{2}{\Delta k} \frac{d\omega}{dk} = \frac{2L}{2\pi \sqrt{\frac{4c_1}{M} \frac{a}{2} \cos \frac{ka}{2}}} =$$

$$= \frac{2N}{\pi \sqrt{\frac{4c_1}{M} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{ka}{2}}}} =$$

$$= \frac{2N}{\pi \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

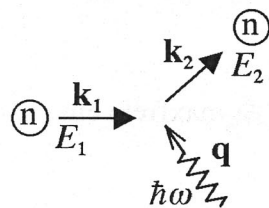
V10. Inelastisk neutronspridning



$a = 4,25 \text{ \AA}$
$m_n = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
$\lambda_1 = 3,50 \text{ \AA}$
$\mathbf{k}_1 // [100]$
$\lambda_2 = 2,33 \text{ \AA}$
$\mathbf{k}_2 // [111]$

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

1:a BZ:  $|k_x|, |k_y|, |k_z| \leq \frac{\pi}{a} = 0,74 \text{ \AA}^{-1}$



a)  $\lambda_2 < \lambda_1 \Rightarrow E_2 > E_1$ ,  
dvs neutronerna vinner energi  
 $\Rightarrow$  fononer förintas

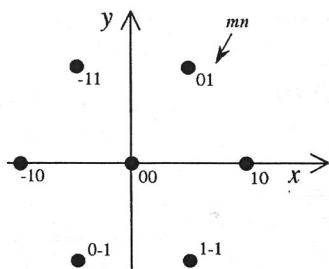
b) Energikonservering:  $E_1 + \hbar\omega = E_2$

$$\Rightarrow \omega = \frac{1}{\hbar} (E_2 - E_1) = \frac{\hbar}{2m_n} \left[ \left( \frac{2\pi}{\lambda_2} \right)^2 - \left( \frac{2\pi}{\lambda_1} \right)^2 \right] =$$

$$= \frac{\pi\hbar}{m_n} \left( \frac{1}{\lambda_2^2} - \frac{1}{\lambda_1^2} \right) = 1,29 \times 10^{13} \text{ rad/s}$$



Gitterpunkter ges av  $\mathbf{r}_{mn} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$



Transversella vibrationer:  $\mathbf{u} \perp xy$ -planet

Rörelseekvationen för centrala atomen med kraftverkan mellan närmaste grannar:

$$M\ddot{u}_{00} = c_1(u_{10} + u_{-10} + u_{01} + u_{0-1} + u_{1-1} + u_{-1-1} - 6u_{00})$$

Ansats:  $u_{mn} = u_0 e^{i[\mathbf{k} \cdot (m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2) - \omega t]}$

Insättning och division med  $u_0 e^{-i\omega t}$  ger:

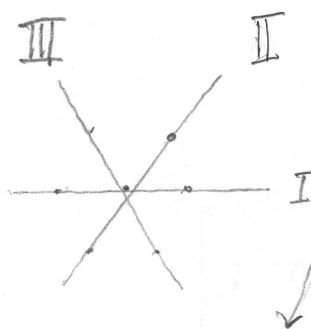
$$-\omega^2 M = c_1 [e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} - 6]$$

$$\Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{4c_1}{M}} \cdot \sqrt{\underbrace{\sin^2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1}{2}}_I + \underbrace{\sin^2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}{2}}_II + \underbrace{\sin^2 \frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}}_III}$$

Insättning av gittervektorer och  $\mathbf{k}$ -punkter ger frekvenserna:

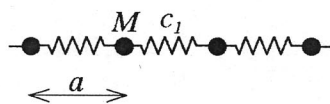
$$\omega_M = \sqrt{\frac{4c_1}{M}} \cdot \sqrt{0 + \sin^2 \frac{\pi}{2} + \sin^2 \left(-\frac{\pi}{2}\right)} = \sqrt{\frac{8c_1}{M}}$$

$$\omega_K = \sqrt{\frac{4c_1}{M}} \cdot \sqrt{\sin^2 \frac{2\pi}{3} + \sin^2 \frac{\pi}{3} + \sin^2 \frac{\pi}{3}} = \sqrt{\frac{9c_1}{M}} = 3\sqrt{\frac{c_1}{M}}$$



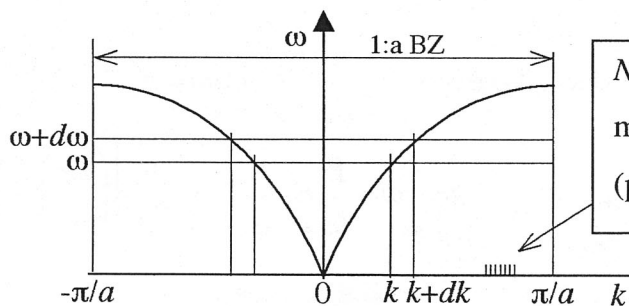
De olika termerna svarar mot svängningar i olika riktningar enligt figur ovan.

V7. Linjär kedja:



$$L = Na$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4c_1}{M}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \Rightarrow \text{maxfrekvens: } \omega_0 = \sqrt{\frac{4c_1}{M}}$$



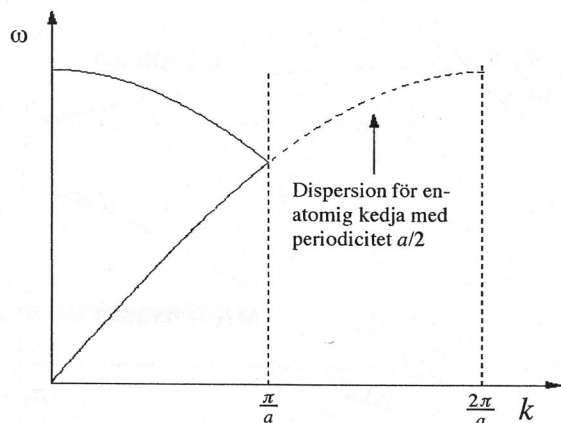
N tillåtna värden på k med mellanrum  $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$  (pga periodiska randvillkor)

Det vill säga: Tillståndstätheten i k-rummet är konstant.

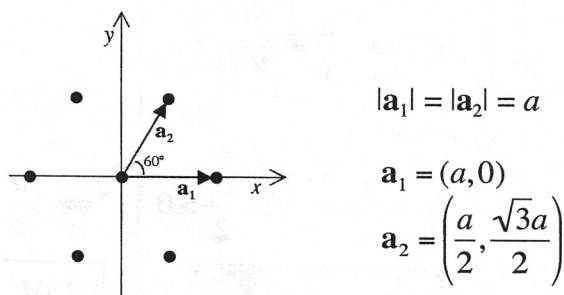
Vad händer om  $M_1 \rightarrow M_2$ ?

Sätt  $M_1 = M_2 = M$  i dispersionsrelationen:

$$\begin{aligned}\omega^2 &= c_1 \frac{2M}{M^2} \pm \sqrt{c_1^2 \frac{4M^2}{M^4} - \frac{4c_1^2}{M^2} \sin^2 \frac{ka}{2}} = \\ &= \frac{2c_1}{M} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \sin^2 \frac{ka}{2}} \right) = \frac{2c_1}{M} \left( 1 \pm \cos \frac{ka}{2} \right)\end{aligned}$$



## V2. Tvådimensionellt tätpackat gitter (nät)



$$|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$$

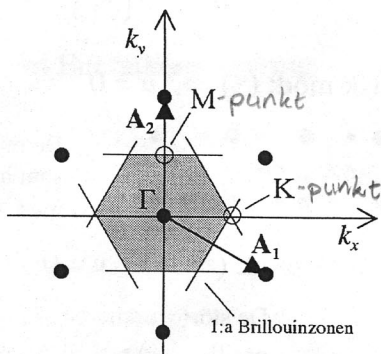
$$\mathbf{a}_1 = (a, 0)$$

$$\mathbf{a}_2 = \left( \frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right)$$

Konstruera reciproka gittervektorer  $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2$

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi \\ \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{A}_1 = \frac{2\pi}{a} \left( 1, \frac{-1}{\sqrt{3}} \right)$$

På samma sätt fås  $\mathbf{A}_2 = \frac{2\pi}{a} \left( 0, \frac{2}{\sqrt{3}} \right)$



Icke-ekvivalenta symmetri-punkter på zongränsen:

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

$$K: \left( \frac{4\pi}{3a}, 0 \right)$$

Det finns sex M-punkter och sex K-punkter.

Rörelsemängdskonservering:  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} = \mathbf{k}_2 (\pm \mathbf{G})$

$$\Rightarrow \mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda_2} \cdot \frac{(1,1,1)}{\sqrt{3}} - \frac{2\pi}{\lambda_1} (1,0,0) = (-0.24, 1.56, 1.56) \text{ \AA}^{-1}$$

$\mathbf{q}$  hamnar utanför 1:a Brillouin-zonen; minska med  $\mathbf{G}_{011}$

$$\Rightarrow \mathbf{q}' = \mathbf{q} - \mathbf{G}_{011} = \mathbf{q} - \frac{2\pi}{a} (0,1,1) = (-0.24, 0.08, 0.08) \text{ \AA}^{-1}$$

E1.

### Tillståndstäthet i elektrongasen

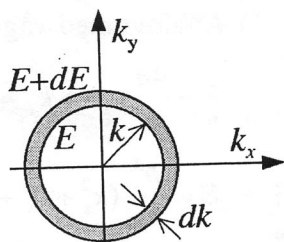
Frielektronmodellen:  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Antal elektrontillstånd med energier i intervallet  $[E, E+dE]$ ?

Tredimensionellt:  $N(E)dE = 2N_k d^3k$  (2 elektroner per  $\mathbf{k}$ -tillstånd)

Tillståndstätheten i  $\mathbf{k}$ -rummet:  $N_k = \frac{V}{8\pi^3}$

Volymen i  $\mathbf{k}$ -rummet som innehåller dessa tillstånd är ett sfäriskt skal med radie  $k$  och tjocklek  $dk \Rightarrow d^3k = 4\pi k^2 dk$

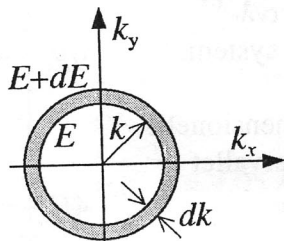


$$N(E) = 2 \frac{V}{8\pi^3} \cdot \frac{4\pi k^2}{\frac{dE}{dk}} = \frac{Vm}{\pi^2 \hbar^2} k = \frac{V\sqrt{2m^3 E}}{\pi^2 \hbar^3}$$

dvs  $N(E) = C_3 E^{1/2}$ , med  $C_3 = \frac{V\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3}$ .

Tvådimensionellt:  $N(E)dE = 2N_k d^2k$ , där  $N_k = \frac{A}{4\pi^2}$

Arean i  $\mathbf{k}$ -rummet är nu en cirkulär ring med radie  $k$  och tjocklek  $dk \Rightarrow d^2k = 2\pi k dk$

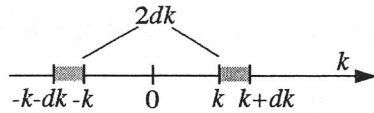


$$N(E) = 2 \frac{A}{4\pi^2} \cdot \frac{2\pi k}{\frac{dE}{dk}} = \frac{Am}{\pi \hbar^2}$$

dvs  $N(E) = C_2 E^0$ , med  $C_2 = \frac{Am}{\pi \hbar^2}$

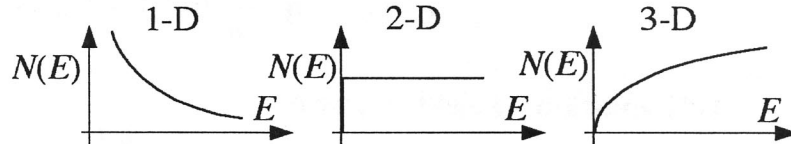
Endimensionellt:  $N(E)dE = 2N_k \cdot 2dk$ , där  $N_k = \frac{L}{2\pi}$

Tillstånden finns i två segment av  $k$ -linjen med sammanlagda längden  $2dk$ .



$$N(E) = 2 \frac{L}{2\pi} \cdot 2 \frac{1}{\frac{dE}{dk}} = \frac{2L}{\pi} \cdot \frac{m}{\hbar^2 k} =$$

$$= \frac{2Lm}{\pi \hbar^2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}}, \quad \text{dvs } N(E) = C_1 E^{-1/2}, \quad \text{med } C_1 = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi \hbar}$$



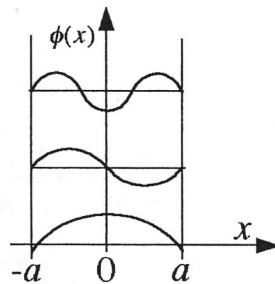
### E2(a). Tvådimensionell kvantgrop

$$U = \begin{cases} 0 & \text{för } |x| < a \\ \infty & \text{för } |x| > a \end{cases}$$

$$\psi(x, y, z) = \phi(x) e^{i(k_y y + k_z z)}, \quad \text{där } \phi(x) = (A \cos k_x x + B \sin k_x x)$$

$$\text{Randvillkor: } \psi(x, y, z) = 0 \quad \text{för } |x| \geq a \quad (\approx \text{en atomradie})$$

$\Rightarrow$  Diskreta värden på  $k_x$ :



Analogt med vågor på inspänd sträng:

$$\lambda = \frac{4a}{n} \quad \Rightarrow \quad k_x = n \cdot \frac{\pi}{2a}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \underbrace{\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}}_{= E_0} n^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(k_y^2 + k_z^2)}_{k_{\parallel}^2}$$

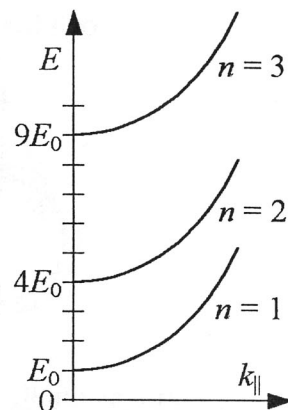
$$\text{Lägsta energinivån för } n = 1, k_x = k_y = 0: \quad E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

$$(\text{Exempel: } a = 2 \text{ \AA} \Rightarrow E_0 = 2,3 \text{ eV})$$

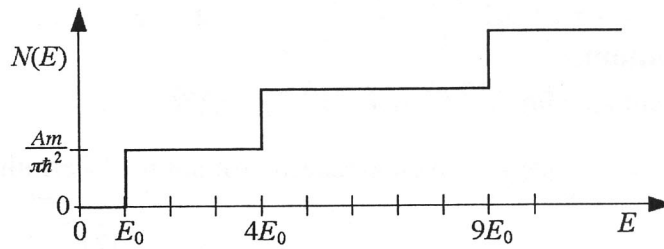
Kan ses som delvis överlappande tvådimensionellt system.

"Rent" tvådimensionellt beteende i intervallet från  $E_0$  till  $4E_0$ .

$$k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$$

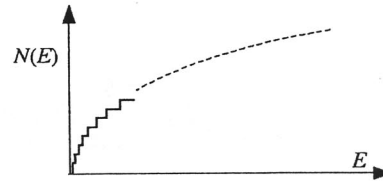


Varje  $\phi(x)$ -tillstånd bidrar med  $\frac{Am}{\pi\hbar^2}$  till  $N(E)$ :



Tjockare kvantgropar:

Mer tredimensionellt utseende



E3.

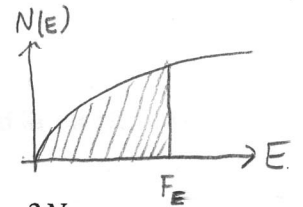
### Elektrongasens tillståndstäthet

Tredimensionell elektrongas:  $N(E) = C_3 \sqrt{E}$

Vid 0 K är alla tillstånd upp till  $E_F$  fyllda.

Total antalet elektroner:

$$N = \int_0^{E_F} N(E) dE = C_3 \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = C_3 \frac{2}{3} E_F^{3/2} \Rightarrow C_3 = \frac{3N}{2E_F^{3/2}}$$



Totala kinetiska energin:

$$E_K = \int_0^{E_F} E N(E) dE = \frac{3N}{2E_F^{3/2}} \int_0^{E_F} E^{3/2} dE = \frac{3}{5} N E_F$$

Medelenergin hos en elektron är  $\frac{2}{5}$  av Fermienergin.

E5.

### Frielektronmodellen

Elektrongasens tillståndstäthet:  $N(E) = \frac{V\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E}$  (I)

Genomsnittlig separation mellan energinivåerna:  $\Delta E = \frac{1}{N(E)}$  (II)

Nära  $E_F$ :  $\Delta E = \frac{1}{N(E_F)}$  → Antal valenselektroner per cell

Al:  
fcc,  $a = 4,05 \text{ \AA}$   
3 valens-  
elektroner/atom

$\Rightarrow n = \frac{3 \cdot 4}{a^3} = 1,81 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$  (III)

$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = 1,87 \times 10^{-18} \text{ J}$  (IV)

$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^3}{V \sqrt{2m^3 E_F}} = \frac{6,88 \times 10^{-48} \text{ Jm}^3}{V}$  (V)

sätt ihop (I - IV)

a)  $V = 10 \text{ cm}^3 = 10 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \Rightarrow \Delta E = 6,88 \times 10^{-43} \text{ J} = \underline{0,43 \times 10^{-23} \text{ eV}}$

b)  $V = 10 \text{ } \mu\text{m}^3 = 10 \times 10^{-18} \text{ m}^3 \Rightarrow \Delta E = \underline{0,43 \times 10^{-11} \text{ eV}}$

c)  $V = 100 \text{ } \text{Å}^3 = 100 \times 10^{-30} \text{ m}^3 \Rightarrow \Delta E = \underline{0,43 \text{ eV}}$  — energinivåerna märkbart separerade

— så tätt att kontinuerlig modell är en mycket god approximation.

E9.

**Aluminium:**

$E_F = 12 \text{ eV}; \rho = 3 \times 10^{-8} \Omega\text{m}$

De aktiva elektronerna rör sig med Fermihastigheten:

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} = 2,05 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \Rightarrow n = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} = 1,9 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$$

$\tau$ : relaxationstid. Ju högre  $\tau$  desto längre tid mellan elektronkrockar och därmed högre ledningsförmåga.

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \Rightarrow \tau = \frac{m}{\rho ne^2} = 6,2 \times 10^{-15} \text{ s}$$

Fria medelväglängden  $\Lambda = v_F \tau = \underline{128 \text{ Å}}$

Pålagt yttre fält:  $E = 1000 \text{ V/m}$

$\rho$ : resistiviteten

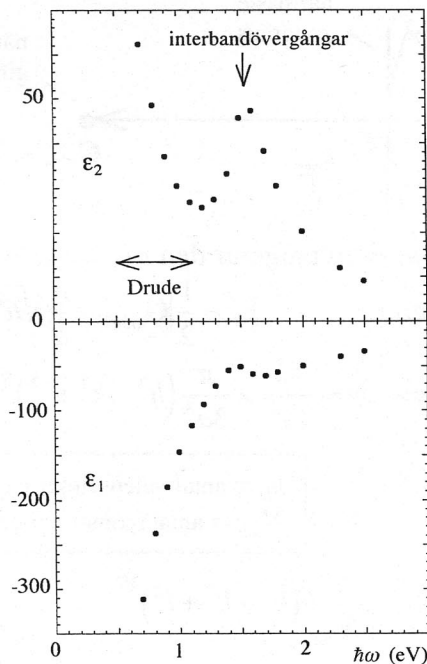
Strömtätheten:  $j = \frac{E}{\rho}$   
och  $j = nev_D$  }  $\Rightarrow nev_D = \frac{E}{\rho} \Leftrightarrow$

$n$  täthet  
 $e$  antal laddningar  
 $v_D$  drifhastighet

$$\Leftrightarrow v_D = \frac{E}{ne\rho} = \underline{1,1 \text{ m/s}} \ll v_F$$

E11.

**Optisk absorption**

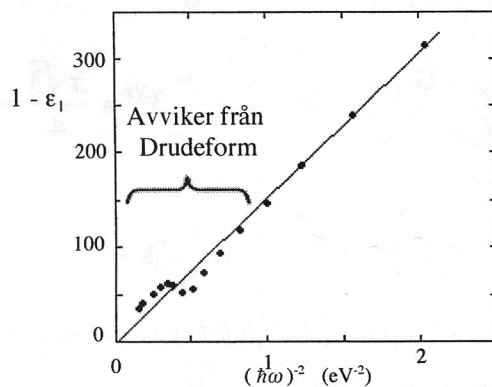


$$\text{Drude: } \begin{cases} \epsilon_1 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}} \\ \epsilon_2 = \frac{1}{\omega\tau} \cdot \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}} \end{cases}$$

Om  $\omega\tau \ll 1$  gäller att

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &\approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 1 - \frac{(\hbar\omega_p)^2}{(\hbar\omega)^2} \\ \Rightarrow 1 - \epsilon_1 &\approx \frac{(\hbar\omega_p)^2}{(\hbar\omega)^2} \end{aligned}$$

Plotta  $1 - \epsilon_1$  som funktion av  $\frac{1}{(\hbar\omega)^2}$  !



Anpassning av rät linje ger:

$$\begin{aligned} (\hbar\omega_p)^2 &= 154 \text{ eV}^2 \\ \Rightarrow \hbar\omega_p &= \underline{12,4 \text{ eV}} \end{aligned}$$

E13.

**Värmekapacitet**

$$3,2 \text{ eV} = 5,12 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Na: 1 valenselektron per atom;  $E_F = 3,2 \times 10^{-19} \text{ J}$ ;  $\theta_D = 160 \text{ K}$

Värmekapacitet vid  $T = 300 \text{ K}$ :

Gitterbidraget:  $T > \theta_D \Rightarrow C_L \approx 3Nk_B$  (Dulong-Petits lag)

Elektronbidraget:  $C_E = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 N(E_F) T$  (\*)

$$N(E) = \frac{3N}{2E_F^{3/2}} \sqrt{E} \quad (\text{se uppgift E3}) \Rightarrow N(E_F) = \frac{3N}{2E_F}$$

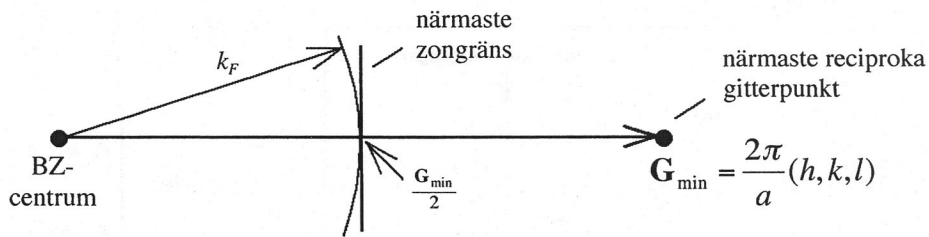
$$\text{Insättning i (*) ger: } C_E = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \frac{3N}{2E_F} T = \frac{\pi^2 k_B^2 N T}{2E_F}$$

$$\frac{C_L}{C_E} = \frac{3Nk_B \cdot 2E_F}{\pi^2 k_B^2 N T} = \frac{6E_F}{\pi^2 k_B T} = 75,2$$

$$\text{Elektronernas andel: } \frac{C_E}{C_E + C_L} = \frac{1}{1 + C_L/C_E} = 0,013 = \underline{1,3 \%}$$

EF1.

Fermisfär vid zongräns



Betrakta en Fermisfär (radie  $k_F$ ) som tangerar den närmaste zongränsen:

Kubiska strukturer:  $k_F = \frac{1}{2} |\mathbf{G}_{\min}| = \frac{\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \Leftrightarrow n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{\pi}{3a^3} (h^2 + k^2 + l^2)^{3/2}$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{n_0 N_{\text{cell}}}{a^3}$$

$n_0$  = antal valenselektroner per atom  
 $N_{\text{cell}}$  = antal atomer per enhetscell

$$\Rightarrow n_0 = n \frac{a^3}{N_{\text{cell}}} = \frac{\pi}{3N_{\text{cell}}} (h^2 + k^2 + l^2)^{3/2}$$

bcc:

$$\left. \begin{matrix} \mathbf{G}_{\min} = \mathbf{G}_{110} \\ N_{\text{cell}} = 2 \end{matrix} \right\} \Rightarrow n_0 = \frac{\pi}{6} 2^{3/2} = \frac{\pi\sqrt{2}}{3} = 1.48$$

icke heltalslösningar  
tillämpbart på  
legeringar.

fcc:

$$\left. \begin{matrix} \mathbf{G}_{\min} = \mathbf{G}_{111} \\ N_{\text{cell}} = 4 \end{matrix} \right\} \Rightarrow n_0 = \frac{\pi}{12} 3^{3/2} = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} = 1.36$$

EF2.

Tomma gittret

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a} (k'_x, k'_y, k'_z) \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2$$

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

[111]-riktningen:  $k'_x = k'_y = k'_z = k'$

Zongräns:  $k' = 1/2$  ( $k' = 1$  svarar mot  $\mathbf{G}_{111}$ )

Beräkna banden för  $0 \leq k' \leq 1/2$  (från  $\Gamma$  till L)

$\Gamma$  origo  
L mittpunkt på  
hexagon

Använd normaliserad energi:  $\lambda = E \frac{ma^2}{2\pi^2 \hbar^2}$

$$\Rightarrow \lambda = (k' - h)^2 + (k' - k)^2 + (k' - l)^2$$

Beräkna för de minsta  $\mathbf{G}$ -vektorerna:

a)  $\mathbf{G} = \{000\} \Rightarrow \lambda_1 = 3(k')^2$

↑ dimensionslös  
vågvektor  
↑ millerindex-k

b)  $\mathbf{G} = \{111\} \Rightarrow \lambda_2 = 3(k' - 1)^2$

$$\Rightarrow \lambda_3 = 2(k' - 1)^2 + (k' + 1)^2$$

$$\Rightarrow \lambda_4 = (k' - 1)^2 + 2(k' + 1)^2$$

$$\Rightarrow \lambda_5 = 3(k' + 1)^2$$

c)  $\mathbf{G} = \{200\} \Rightarrow \lambda_6 = (k' - 2)^2 + 2(k')^2$

$$\Rightarrow \lambda_7 = (k' + 2)^2 + 2(k')^2$$

(111)

$(\bar{1}11), (1\bar{1}1), (11\bar{1})$

$(\bar{1}\bar{1}1), (1\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}1\bar{1})$

$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$

$(200), (020), (002)$

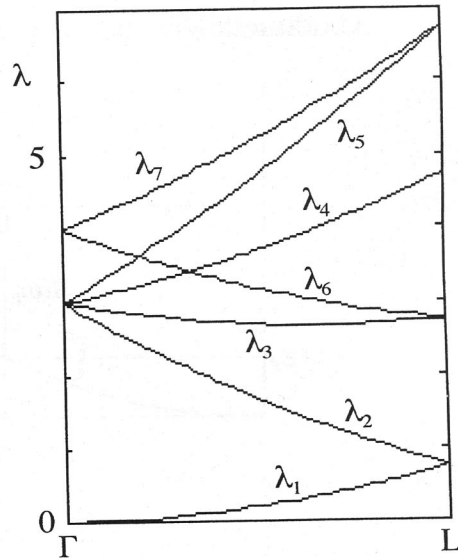
$(\bar{2}00), (0\bar{2}0), (00\bar{2})$

trefaldiga genererade  
band

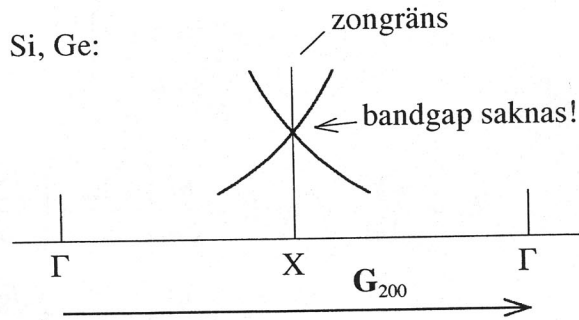
15 st på sju olika band



Tomma gittret (fcc):



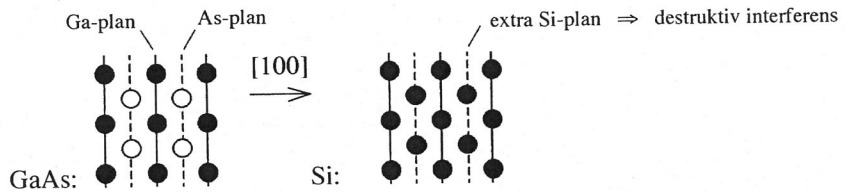
EF6. **Bandstruktur**



Diamantstruktur: fcc + bas (0,0,0) och (1/4,1/4,1/4)

Bandgap vid X orsakas av diffraktion med  $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}_{200}$ .

$$\text{Men } S_{200} = f \left[ 1 + e^{i\frac{\pi}{2}(2+0+0)} \right] = 0 \Rightarrow \text{ingen 200-reflex} \\ \Rightarrow \text{inget bandgap}$$

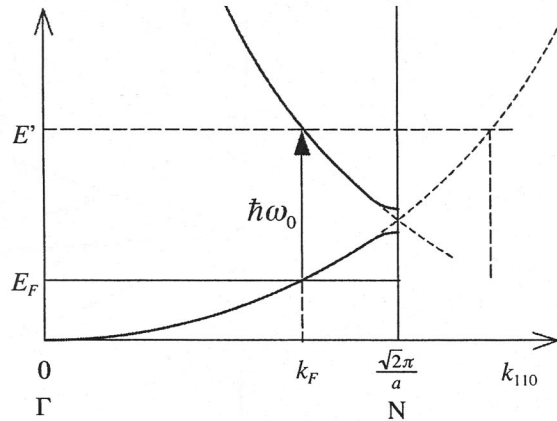


(Alternativt:  $E_g = 2|V_G|$ , men  $V_G = 0$  då  $S_G = 0$ .)

Olika atomtyper med olika formfaktor, vilket gör att reflexerna inte tar ut varandra.

EF9.

**Alkalimetaller:** bcc, monovalenta, små bandgap



Minsta reciproka gittervektor:

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

Punkt på zongränsen närmast zoncentrum finns vid:

$$\frac{1}{2}\mathbf{G}_{\min} \text{ (N-punkten)}$$

Optisk absorptionskant vid  $\hbar\omega_0$  (opåverkad av bandgapet)

Bandet under  $E_F$  är frielektronlikt:

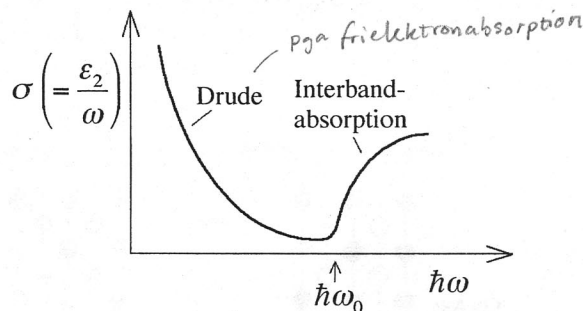
$$\left. \begin{aligned} k_F &= (3\pi^2 n)^{1/3} \\ n &= \frac{n_0 N_{\text{cell}}}{a^3} = \frac{2}{a^3} \end{aligned} \right\} \Rightarrow k_F = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \text{ och } E' = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\sqrt{2}\pi}{a} + \left( \frac{\sqrt{2}\pi}{a} - k_F \right) \right]^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\sqrt{8}\pi}{a} - k_F \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{8\pi^2}{a^2} - \frac{2\sqrt{8}\pi}{a} k_F + k_F^2 \right)$$

$$\frac{\hbar\omega_0}{E_F} = \frac{E' - E_F}{E_F} = \frac{\frac{8\pi^2}{a^2} - \frac{2\sqrt{8}\pi}{a} k_F}{k_F^2} = \frac{8\pi^2}{a^2 k_F^2} - \frac{2\sqrt{8}}{a k_F} = \frac{8\pi^2}{(6\pi^2)^{2/3}} - \frac{2\sqrt{8}}{(6\pi^2)^{1/3}} = 0,64$$

EF11.

**"Myntmetaller"**



Cu:  $\hbar\omega_0 \approx 2 \text{ eV} \Rightarrow \lambda_0 = \frac{hc}{\hbar\omega_0} \approx 620 \text{ nm}$  (orangerött)

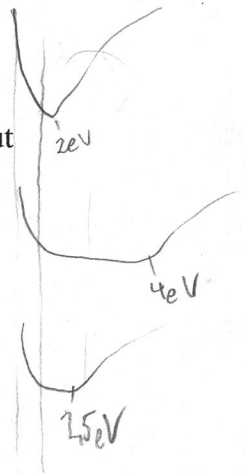
Absorberar alla synliga våglängder utom rött  $\Rightarrow$  ser rött ut

Ag:  $\hbar\omega_0 \approx 4 \text{ eV} \Rightarrow \lambda_0 \approx 310 \text{ nm}$  (UV)

Absorberar ej synligt ljus  $\Rightarrow$  ser vitt ut

Au:  $\hbar\omega_0 \approx 2,5 \text{ eV} \Rightarrow \lambda_0 \approx 500 \text{ nm}$  (blågrönt)

Absorberar främst blått och violett ljus  $\Rightarrow$  ser gult ut (grönt i transmission)



H1.

**Hålltillstånd**

$$E = E_{\text{vmax}} - 10^{-37} k^2; \quad \text{Borttagen elektron: } k_e = 10^9 \text{ m}^{-1}$$

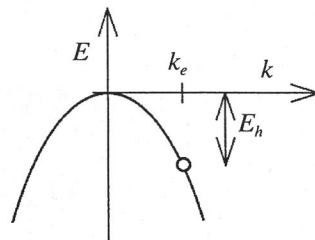
a) Elektronens effektiva massa:  $m_e = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} = \frac{\hbar^2}{-2 \times 10^{-37}} = -6 \times 10^{-32} \text{ kg}$

Hålets effektiva massa:  $m_h = -m_e = 6 \times 10^{-32} \text{ kg} (= 0,06 m_0)$

b)  $k_h = -k_e = -10^9 \text{ m}^{-1}$

c)  $v_h = v_e = \frac{\hbar k_e}{m_e} = -2 \times 10^6 \text{ m/s}$

d)  $E_h = 10^{-37} k^2 = 1 \times 10^{-19} \text{ J} = 0,6 \text{ eV}$



H3.

**Germanium**

Massverkans lag:  $np = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$

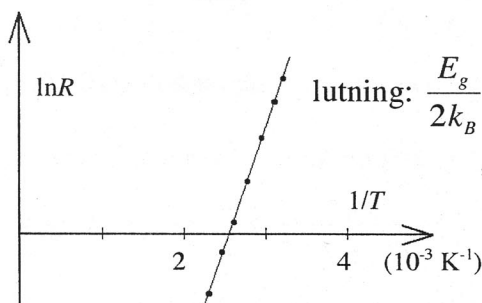
Intrinsisk halvledare:  $n_i = p_i = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$

Konduktivitet:  $\sigma_i = n_i e \mu_e + p_i e \mu_h = A e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$

där  $A = e(\mu_e + \mu_h) \cdot 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4}$  har försumbart  $T$ -beroende

För givet prov:  $R \propto \overset{\text{resistivitet}}{\rho} = \frac{1}{\underset{\text{konduktivitet}}{\sigma}} \Rightarrow R = A' e^{\frac{E_g}{2k_B T}} \Leftrightarrow \ln R = \ln A' + \frac{E_g}{2k_B T}$

Plotta  $\ln R$  mot  $\frac{1}{T}$ : rät linje med lutning  $\frac{E_g}{2k_B}$  om provet är intrinsiskt.



$$\Rightarrow E_g = 1,08 \times 10^{-19} \text{ J} = \underline{0,676 \text{ eV}}$$

H5.

**Kisel**

Ur tabell:  $E_g = 1,14 \text{ eV}; \quad \mu_e = 0,16 \text{ m}^2/\text{Vs}; \quad m_e = 0,26 m_0$   
 $\mu_h = 0,05 \text{ m}^2/\text{Vs}; \quad m_h = 0,50 m_0$

Rumstemperatur: räkna med  $T = 300 \text{ K} \Rightarrow k_B T = 0,02585 \text{ eV}$

a) Intrinsiskt:  $n_i = p_i = \sqrt{n_0 p_0} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = 1,44 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$

$$\sigma_i = n_i e (\mu_e + \mu_h) = \underline{5 \times 10^{-5} (\Omega\text{m})^{-1}}$$

b) Extrinsiskt:  $n$ -dopning med fosfor;  $N_p = 10^{20} \text{ m}^{-3}$ ;  $E_d = 45 \text{ meV}$ .

Antag att alla P-atomer är joniserade och att  $p \ll n$ :

$$n \approx N_{p+} \approx N_p = 10^{20} \text{ m}^{-3}$$

$n_i$ : intrinsisk  
koncentration

$$p = \frac{n_i^2}{n} = 2 \times 10^{10} \text{ m}^{-3} \quad (\text{dvs } p \ll n \text{ som antagits})$$

c)

$$p = p_0 e^{-\frac{E_F}{k_B T}}$$

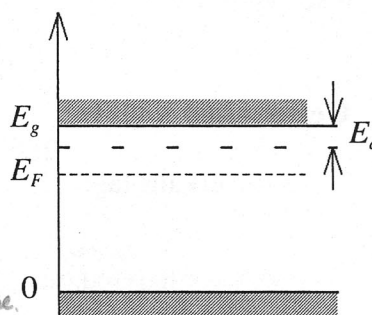
$$p_0 = 2 \left( \frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} = 9 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$$

$$\Rightarrow E_F = k_B T \ln \frac{p_0}{p} = 0,87 \text{ eV}$$

Donatornivåerna ligger  
ca 0,2 eV över  $E_F$

$\Rightarrow$  merparten är joniserade

På Fermivånen  $\Rightarrow$  50% joniserade.



H6.

### Galliumarsenid

Ur tabell:  $E_g = 1,4 \text{ eV}$ ;  $\mu_e = 0,85 \text{ m}^2/\text{Vs}$ ;  $m_e = 0,07 m_0$   
 $\epsilon_r = 13,5$   $\mu_h = 0,04 \text{ m}^2/\text{Vs}$ ;  $m_h = 0,68 m_0$

Rumstemperatur: räkna med  $T = 300 \text{ K} \Rightarrow k_B T = 0,02585 \text{ eV}$

a) Intrinsiskt:  $n_i = p_i = \sqrt{n_0 p_0} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} =$   
 $= 4,5 \times 10^{12} \text{ m}^{-3}$

$$\sigma_i = n_i e (\mu_e + \mu_h) = 6,4 \times 10^{-7} (\Omega \text{m})^{-1}$$

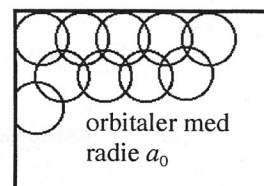
Dopning: As-atomer ersätts av Se  $\Rightarrow$  en extra elektron per Se-atom

b) Jonisationsenergi:  $E_d \approx \frac{m_e e^4}{8(\epsilon_r \epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{m_e}{m_0} \cdot \frac{E_H}{\epsilon_r^2} \approx 5 \text{ meV}$  ( $E_H = 13,6 \text{ eV}$ ) *liten jonisationsenergi gör att dopning fungerar*

c) Banradie:  $r_0 \approx \frac{\epsilon_r \epsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e^2} = \frac{\epsilon_r}{m_e/m_0} \cdot a_0 \approx 102 \text{ \AA}$  ( $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$ )

d) Se-orbitalerna kan anses överlappa när volymen av "Se-sfärerna" är lika med provets volym.

$$\Rightarrow N_{Se} = \frac{1}{V_{orb}} = \frac{3}{4\pi r_0^3} \approx 2,25 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$$



e) Antag att  $N_{Se+} = N_{Se}$  ( $k_B T \gg E_d$ )

$$n = n_0 e^{\frac{E_F - E_g}{k_B T}}$$

$$p = p_0 e^{-\frac{E_F}{k_B T}}$$

$$n_0 = 2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} = 4,70 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$$

Laddningsneutralitet  $\Rightarrow n = p + N_{Se+}$

$$\Rightarrow n_0 e^{\frac{E_F - E_g}{k_B T}} = p_0 e^{-\frac{E_F}{k_B T}} + N_{Se+}$$

Antag att  $p \ll n$

$$\Rightarrow n_0 e^{\frac{E_F - E_g}{k_B T}} = N_{Se+} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow E_F = E_g + k_B T \ln \frac{N_{Se+}}{n_0} = E_g - 20 \text{ meV} = 1,38 \text{ eV (preliminärt)}$$

Kontroll:  $N_{Se+} = N_{Se} \left( 1 - \frac{1}{e^{\frac{E_g - E_d - E_F}{k_B T}} + 1} \right) = 0,64 N_{Se}$

Endast 64 % joniserade; beräkna  $E_F$  igen!

$$N_{Se+} = 0,64 N_{Se} \Rightarrow E_F = E_g - 31 \text{ meV} = 1,37 \text{ eV}$$

$$n = N_{Se+} = 0,64 N_{Se} = 1,4 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$$

$n_i = 4,5 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$   
ura)

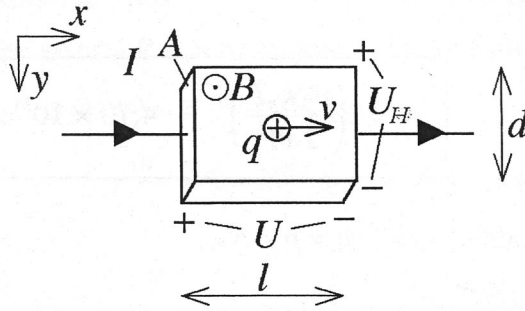
$$p = \frac{n_i^2}{n} = 1,4 \times 10^{22} \text{ m}^{-3} \quad (\text{antagandet bekräftat})$$

(Jmf intrinsisk GaAs:  $E_F = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_h}{m_e} = 0,74 \text{ eV}$ )

1,37  $\approx$  1,38  
rätt storleksordning,  
ytterligare itereringar  
ej nödvändiga

H13.

Hall-effekt



$l = 10 \text{ mm}$
$d = 4 \text{ mm}$
$A = 4 \text{ mm}^2$
$I = 1,5 \text{ mA}$
$B = 0,7 \text{ T}$
$U = 78 \text{ mV}$
$U_H = 6,8 \text{ mV}$

Kraft p g a  $U_H$ :  $F_H = qE_H = q \frac{U_H}{d}$  i y-riktningen

Kraft p g a  $B$ :  $F_B = qvB$  i y-riktningen

Vid jämvikt ska  $F_H$  och  $F_B$  vara motriktade

$$\Rightarrow q < 0, \text{ n-typ}$$

$$|R_H| = \frac{E_H}{jB} = \frac{U_H A}{dIB} = 6,48 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{As}$$

$$\sigma = \frac{j}{E} = \frac{Il}{AU} = 48,1 (\Omega\text{m})^{-1}$$

$$n = \frac{1}{e|R_H|} = 9,6 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$$

$$\mu = \frac{\sigma}{ne} = \sigma|R_H| = 0,31 \text{ m}^2/\text{Vs}$$

$\sigma = ne\mu_e$   
eftersom vi kan  
försumma hälen