

Struktur, diffraktion

1. Hur ser det reciproka gittret ut för en- och tvådimensionella gitter?

Det reciproka gittrets basvektorer definieras som

$$\vec{G}_{hkl} = 2\pi \frac{\vec{n}_{hkl}}{d_{hkl}}$$

där \vec{n}_{hkl} är normalvektorer till gitterplanen (hkl) med planavstånden d_{hkl} . Detta kan också uttryckas som

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}$$

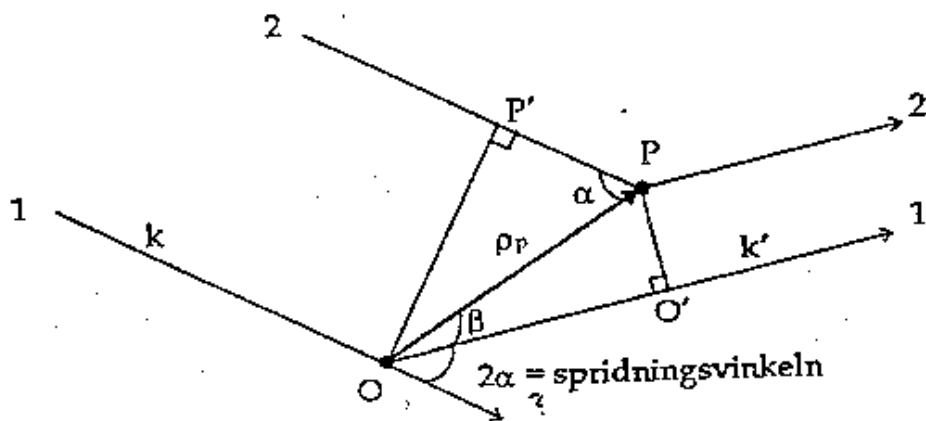
För ett endimensionellt gitter har vi punkter med avståndet $2\pi/a$.

För ett tva-dimensionellt gitter har vi

$$b_1 = 2\pi \frac{(a_{22}, -a_{21})}{|a_1 \times a_2|} \quad b_2 = 2\pi \frac{(a_{12}, -a_{11})}{|a_1 \times a_2|}$$

- plan
- stavar

2. Härled Laues diffraktionsvillkor.



Antag att de infallande strålarna 1 och 2 är en plan våg. Fassetillnaden mellan stråle 1 och 2 efter spridning (nu 1' och 2') blir

$$\frac{2\pi}{\lambda} (|OO'| - |PP'|) = \vec{k} \cdot \vec{\rho}_p - \vec{k}' \cdot \vec{\rho}_p = \Delta \vec{k} \cdot \vec{\rho}_p$$

Amplituden för den spridda vågen är

$$A \propto \sum_p f_p e^{-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{r}_p} = \left(\sum_j f_j e^{-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{R}_j} \right) \left(\sum_m e^{-i\Delta \vec{k} \cdot m\vec{a}} \right) \left(\sum_n e^{-i\Delta \vec{k} \cdot n\vec{b}} \right) \left(\sum_p e^{-i\Delta \vec{k} \cdot p\vec{c}} \right) = S \cdot GS,$$

där den första termen i produkten är basens strukturfaktor. Atomformfaktorn f_j definieras som

$$f_j = 4\pi \int n_j(\vec{r}) r^2 \frac{\sin(Gr)}{Gr} dr$$

De övriga tre termerna bildar gittersumman. Det är gittersumman som styr om den spridda amplituden blir skild från noll, dvs om vi har diffraktion. För att få $GS \neq 0$ krävs

$$\Delta \vec{k} \cdot \vec{a} = 2\pi h \quad \Delta \vec{k} \cdot \vec{b} = 2\pi n \quad \Delta \vec{k} \cdot \vec{c} = 2\pi p$$

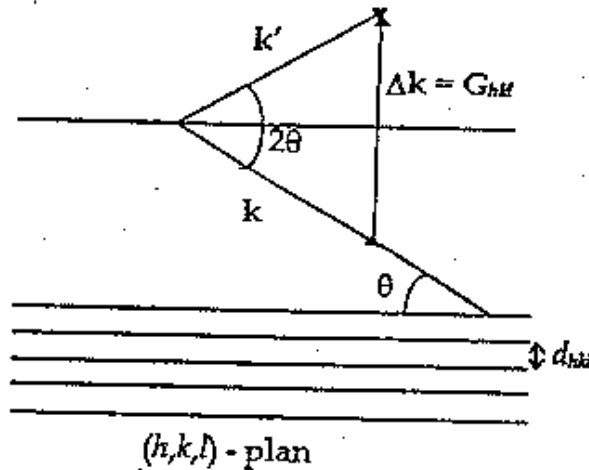
Dessa villkor kallas Laues diffraktionsvillkor. Det kan alternativt ses genom att utgå från det allmänna diffraktionsvillkoret

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

och ta skalärprodukten på båda sidorna. Man utnyttjar då att för det reciproka gittrets basvektorer \vec{b} och rumsgittrets basvektorer \vec{a} gäller

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

3. Härled Braggs lag



Ur figuren fås

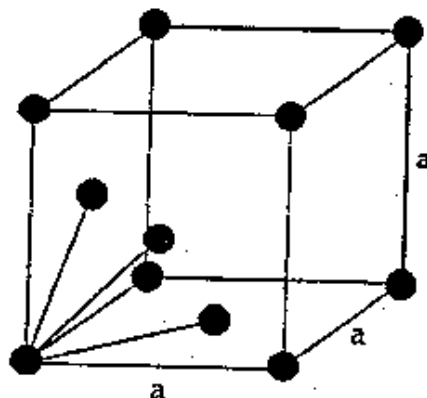
$$k \sin \theta = \frac{1}{2} |\vec{G}_{hkl}|$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{1}{2} \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

vilket ger Braggs lag:

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

4. En fcc-struktur kan beskrivas som ett enkelt kubiskt gitter och en bas med fyra atomer. Ange basen och strukturfaktorn. Vilka index ger utsläckt diffrakterad intensitet?



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

Basen för fcc-gittret har identiska atomer i $(0,0,0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. Insatt i uttrycket för strukturfaktorn S ger detta

$$S(v_1, v_2, v_3) = f \left[1 + e^{-i\pi(v_1+v_2)} + e^{-i\pi(v_1+v_3)} + e^{-i\pi(v_2+v_3)} \right]$$

Med mer än en atom i basen kan vi alltså få utsläckta reflexer p.g.a. $S = 0$ trots att $G_S \neq 0$. I detta fall sker det då v_1, v_2 och v_3 är udda och jämna tal blandat. Vi kan alltså bara få reflexer då alla index är antingen jämna eller udda.

5. Visa att mot bcc i rummet med gitterparametern a svarar fcc i reciproka rummet med gitterparametern $4\pi/a$.

Bcc-gittrets primitiva translationsvektorer är

$$\bar{a}_1 = \frac{1}{2}a(-\bar{e}_x + \bar{e}_y + \bar{e}_z)$$

$$\bar{a}_2 = \frac{1}{2}a(+\bar{e}_x - \bar{e}_y + \bar{e}_z)$$

$$\bar{a}_3 = \frac{1}{2}a(+\bar{e}_x + \bar{e}_y - \bar{e}_z)$$

Genom att använda formlerna i fråga 1 fås

$$\bar{b}_1 = \frac{1}{2} \frac{4\pi}{a} (\bar{e}_y + \bar{e}_z)$$

$$\bar{b}_2 = \frac{1}{2} \frac{4\pi}{a} (\bar{e}_x + \bar{e}_z)$$

$$\bar{b}_3 = \frac{1}{2} \frac{4\pi}{a} (\bar{e}_x + \bar{e}_y)$$

Detta är precis ett fcc-gitter med gitterparametern $4\pi/a$.

Betrakta bcc som två sc. inskjutna rummet och förskjutna $\frac{a}{2}(1,1,1)$

$$G_{S_{bcc}} = G_{S_{sc}} + G_{S_{sc}} e^{-i\Delta k \cdot \frac{a}{2}(1,1,1)}$$

Vi vet att $G_{S_{sc}} = 0$ då $\Delta k = G_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h,k,l)$

$$\text{Sätt in: } (1 + e^{-i\frac{2\pi}{a}(h,k,l) \cdot \frac{a}{2}(1,1,1)}) = 1 + e^{-i\pi(h+k+l)} \neq 0$$

om $h+k+l = \text{jämntal}$

eftersom!

$$\Rightarrow \text{fcc, g.p.} = \frac{4\pi}{a}$$

6. Redogör för Debye-Scherrermetoden för diffraktion.

Man malar ner provet till ett fint pulver. Man kan då anta att alltid något korn är orienterat på så sätt att diffraktionsvillkoren är uppfyllda. Man mäter sedan de spridda strålarnas Braggvinklar. Ur detta erhålls interplanavståndet samt gitterparametern.

7. Redogör för konstruktionen med Ewald-sfären.

1. Rita upp det reciproka gittret.
2. Rita in k så att dess spets träffar en godtycklig punkt i det reciproka gittret.
3. Rita in en cirkel (sfär) med k som radie.
4. Diffrakterade strålars riktning ges av sfärens skärningar med punkter.

8. Vilket villkor ska k -vektorn uppfylla för att en våg som faller in mot en kristall ska diffrakteras?

Vi utgår från $\Delta \vec{k} = \vec{G}_{hkl}$ och $|\vec{k}| = |\vec{k}|$, dvs elastisk enkelspridning. Dessa ger

$$\vec{k} \cdot \vec{G}_{hkl} = \frac{G_{hkl}^2}{2} \rightarrow \vec{k} \cdot (\frac{1}{2}\vec{G}_{hkl}) = (\frac{1}{2}G_{hkl})^2$$

↖ $\because 2k \cdot G_{hkl} = -G_{hkl}^2$

9. Förklara varför lågenergetiska elektroner, som infaller mot en yta ger upphov till ett diffraktionsmönster för alla vågvektorer vars belopp överstiger ett visst värde.

På ytan så uppträder det reciproka gittret som parallella linjer, dvs man ser den vanliga bilden av det reciproka gittret från sidan. Det blir då inte alls lika svårt att få Ewaldsfären att träffa linjerna i detta fall. Villkoret är att $k >$ avståndet mellan linjerna.

10. Vilka är de väsentliga skillnaderna mellan fotoner, elektroner och neutroner i diffraktionsexperiment?

Skillnaden utgörs av vad diffraktionsprocessen beror på.

- Fotoner. Fotonerna exciterar elektroner i atomerna och sprids sedan genom spontan emission.
- Elektroner. P.g.a. laddningen sprids elektronen av bundna elektroner. Elektronens våglängd är beroende av accelerationsspänningen och med typiska energier i området 5-10 keV ger de mycket små Braggvinklar. Därför är det viktigt att spänningen hålls stabil så att monokromatisk elektronstrålning erhålles.
- Neutroner. Det enda sätt man har idag för att skjuta neutroner är på termisk väg. Vid den typiska energin 60°C har de en våglängd på 1.4 Å vilket passar bra för kristalldiffraktion. Neutroner diffrakteras mot atomkärnorna. Neutroner penetrerar längre än elektroner och fotoner.

Defekter

1. Hur sitter atomerna i omgivningen till en kant- respektive skruvdislokation?

- *Kantdislokation.* Ett halvt atomplan sitter instucket mellan två ordinarie plan.
- *Skruvdislokation.* Atomplanen sitter ordnade som våningarna i ett parkeringshus.

2. Utmed vilka plan och längs vilka riktningar sker glidning lättast i metaller med fcc respektive bcc strukturer?

Glidning sker enklast i tätpackade plan, dvs (1 1 1) för fcc och (1 0 0) för bcc, samt i tätpackade riktningar.

3. Definiera Burgers vektor. Beskriv dess riktning i förhållande till dislokationslinje och glidplan för kant- och skruvdislokation.

Burgers vektor, b , beskriver dislokationens riktning och storleken på glidningen. Det är den vektor som återför kristallen till ostört läge. Den kan tas fram på följande sätt:

Antag att dislokationen är vinkelrät mot en godtyckligt vald väg genom ett antal gitterpunkter som omsluter dislokationen. Vägen skall vara lika lång upp och höger samt höger och vänster. För en ideal kristall hade vi kommit tillbaka till samma gitterpunkt, men runt en dislokation gör vi inte det. Burgers vektor är vektorn mellan startpunkten och slutpunkten (eller tvärtom i vissa böcker).

För en kantdislokation är b vinkelrät mot dislokationslinjen som är begränsad av ett visst glidplan. För en skruvdislokation är b parallell med dislokationslinjen som inte har någon begränsning av glidplan.

4. Hur kan kunskaperna om dislokationer utnyttjas för att framställa konstruktionsmaterial med större hållfasthet?

Målet är att blockera dislokationer så att de inte kan röra sig. Detta kan huvudsakligen göras på fyra olika sätt.

Mekaniskt blockera dislokationerna.

Dopa materialet med främmande atomer.

Oordnat material.

Öka antalet dislokationer så mycket att de inte kan röra sig utan att krocka.

5. Hur kan man observera dislokationer?

- *Kristalltillväxt*: Under vissa förhållanden då kristaller tillväxer växer de i spiralmönster runt en skruvdislokation.
- *Etsning*: Om en kristall placeras i vätska där den är något löslig kommer upplösningen av kristallen ske närmast dislokationen. Vi får etsmärken i skärningspunkten mellan en dislokation och en kristallyta.
- *Elektronmikroskopi*: Högenergetiska elektroner diffrakteras på annat sätt i runt en dislokation än i en perfekt kristall. Hela dislokationslinjen kan studeras.
- *Röntgenopografi*: Liknande metod som för elektroner, men med röntgenkvanta istället. Våglängd ca 1 Å. Kvanta är oladdade vilket ger skillnader i växelverkan med kristallen. Kan tränga in djupare än elektroner samt förstör ej kristallen. Dock sämre upplösning.
- *Fältjonmikroskopi*: Enskilda atomer kan studeras genom att först joniseras och sedan accelereras en och en av ett elfält. Då jonerna detekteras kan deras ursprungliga läge bestämmas.

6. Härled ett uttryck för vakanstätheten vid termodynamisk jämvikt i en kristall. Ge typiska värden på vakansbildningsenergin.

Antalet sätt att ta bort n st atomer från N atomer i ett gitter ges av

$$\frac{N!}{n!(N-n)!}$$

Detta ger en konfigurationsentropi (en perfekt kristall har noll entropi vid $T = 0$ K):

$$S_{\text{konfig}} = k_B \ln \left(\frac{N!}{n!(N-n)!} \right) \approx k_B \left[N(\ln N - 1) - ((N-n)(\ln(N-n) - 1) + n(\ln n - 1)) \right]$$

$$= k_B (N \ln N - (N-n) \ln(N-n) - n \ln n)$$

Vid ändliga temperaturer är Gibbs fria energi $G = H - TS$ lägre för kristallen med vakanser än för en perfekt kristall om N är tillräckligt stort. Om E_v är vakansbildningsenergin så ges skillnaden i energi som

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S_{\text{konfig}} = nE_v - Tk_B [N \ln N - (N-n) \ln(N-n) - n \ln n]$$

Vid termodynamisk jämvikt gäller $\partial \Delta F / \partial n = 0$, vilket ger

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

Vidare gäller att $N \gg n$, varför

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

Ett typiskt värde på vakansbildningsenergin är 1 eV / atom.

7. Ge exempel på fysikaliska egenskaper som påverkas av punktdefekter i kristallstrukturen. Beskriv någon experimentell metod för att bestämma vakansbildningsenergin.

- Metaller: Värmeutvidgning, elektrisk konduktivitet.
- Icke-metaller: Densitet, diffusion, elektrisk konduktivitet, optiska och dielektriska egenskaper.

För en metall bidrar vakanserna till resistansen. Tag ett prov med hög temperatur (många vakanser) och kyl detta snabbt till nära nollpunkten. Mät resistansen för detta prov och jämför det med ett prov som kylts långsamt. Vid snabb kylning hinner inte vakanserna fyllas igen och läses i sina lägen. För resistansskillnaden gäller

$$\Delta R \propto e^{-E_v/k_B T}$$

8. Vad är ett F-center?

F-centret (F kommer från tyskans Farbre som betyder färg) är en vakans där en jon försvunnit ur gittret. Om t.ex. en Cl⁻ har lämnat ytan bildas en attraktiv potentialgrop och en elektron kan bindas till denna. Fotoner kan sedan excitera elektronen och vi får en färg då denna återgår till grundtillståndet.

Vibrationer, termiska egenskaper

1. Vilka fysikaliska egenskaper kan relateras till atomernas svängningar kring sina gitterplatser?

- Värme kapacitet
- Termisk expansion
- Ljudöverföring

2. Visa att gittersvängningarnas bidrag till värmekapaciteten i Einsteinmodellen går mot $3R$ vid höga temperaturer och mot 0 vid låga.

Einsteinmodellen säger att tillståndtätheten för N oscillatorer med samma frekvens ω_0 i en dimension är

$$D(\omega) = N\delta(\omega - \omega_0)$$

Den termiska energin blir då

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

$$\left. \begin{aligned} U_E &\approx 3N \cdot \hbar \omega \cdot \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \\ &\approx 3N \hbar \omega \cdot \frac{k_B T}{\hbar \omega} \approx 3N k_B T \end{aligned} \right\}$$

Genom att derivera detta uttryck m.a.p. temperaturen τ och ersätta N med $3N$ fås värmekapaciteten i tre dimensioner

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{\tau} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/\tau}}{(e^{\hbar\omega/\tau} - 1)^2}$$

Genom att låta τ gå mot ∞ resp 0 fås $C_V = 3R$ respektive $C_V = 0$.

2. Debye antog att dispersionsrelationen för gittersvängningar var linjär. Vi vet att detta är felaktigt för relativt höga frekvenser. Varför ger Debye-modellen ändå en bra uppskattning av specifika värmets vid låga temperaturer?

Vid låga temperaturer är bara akustiska moder med lång våglängd exiterade. Det är just dessa moder som gör att materialet kan ses som ett elastiskt kontinuum med makroskopiska elasticitetskonstanter. Energin för korta våglängder (höga frekvenser) är för hög för att dessa ska vara termiskt besatta i nämnvärd utsträckning vid låga temperaturer.

3. Härled dispersionsrelationen för en linjär kedja av atomer med växelverkan enbart mellan närmaste grannar. Visa att alla svängningstillstånd kan beskrivas med vågvektorer inom ett intervall $\Delta k = 2\pi/a$, där a är gitterkonstanten.

Om vi enbart har växelverkan mellan närmaste grannar kan kraften på atomerna s skrivas som

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

där u_s är avvikelsen från jämviktsläget för atomerna s och C är fjäderkonstanten mellan atomerna. Detta leder till rörelseekvationen

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = C(u_{s+1} - 2u_s + u_{s-1}).$$

Vi antar nu en lösning för avvikelsen u_s som innehåller en svängningsterm i tiden och en vandrande våg-effekt (har man väl antatt tidstermen är vandrande våg-lösningen den enda):

$$u_s = u e^{ik_s a} e^{-i\omega t}.$$

Detta ger oss

$$\omega^2 M = -C(e^{ik_s a} + e^{-ik_s a} - 2) = 2C(1 - \cos K a)$$

som är den önskade dispersionsrelationen. Man ser direkt att eftersom \cos är periodisk kan alla svängningstillstånd ω beskrivas med ett K inom $0 < K < 2\pi/a$.

4. Inför periodiska randvillkor och beräkna tillståndstätheten i k -rummet för den linjära kedjan. Vad blir tillståndstätheten $N(\omega)$ för kedjan i uppgift 4?

Vi ser kristallen som oändlig men vi inför ett periodicitetsvillkor s.a. $u(sa) = u(sa + L)$. Om detta ska gälla för den vandrande våglösningen så måste K vara så att $KL = n \cdot 2\pi$. Värdet på heltalet n har dock en övre begränsning: det får inte vara större än antalet atomer som får plats på sträckan L . Om det vore det så skulle våglängden bli kortare än avståndet mellan atomerna och det är orimligt eftersom det är atomerna som bär svängningen.

Tillståndstätheten i frekvens ges av

$$D(\omega)d\omega = \frac{L}{\pi} \frac{dK}{d\omega} d\omega = \frac{L}{\pi} \frac{d\omega}{dK}$$

Med dispersionsrelationen från uppgift 4 fås

$$D(\omega) = \frac{L a \sqrt{\frac{2M}{C}(1 - \cos Ka)}}{\pi \sin Ka}$$

6. Härled ett uttryck för $D(\omega)$ i Debye-modellen i tre dimensioner.

Vi utgår från den generella tillståndstätheten i tre dimensioner (för varje polarisering)

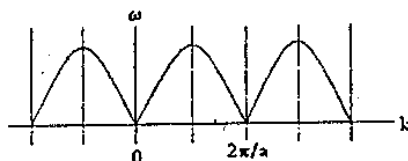
$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{VK^2}{2\pi^2} \left(\frac{dK}{d\omega} \right)$$

Debye-approximationen säger att ljudhastigheten för varje polarisering är konstant. Detta vore helt sant om gitterkonstanten a vore 0, dvs materialet vore ett kontinuum. Vi har då dispersionsrelationen $\omega = vK$ vilket ger oss

$$D(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3}$$

7. Definiera begreppet Brillouinzoner.

Brillouinzoner är zoner i det reciproka gittret. Den första Brillouin-zonen är en Wigner-Seitz primitivcell runt en reciprok gitterpunkt.



Figur 5.20 i Myers.

Den första Brillouin-zonen sträcker sig från $-\pi/a$ till $+\pi/a$. De övriga zonerna ligger uppdelade på symmetriska intervall runt den 1:a zonen. En godtycklig vågvektor kan alltid projiceras in i 1:a zonen med hjälp av en reciprok gittervektor G .

Zongränserna bestäms genom att dra upp linjer mellan en gitterpunkt och dess grannar, för att sedan bilda plan normala till dessa sträckor halvvägs. Villkoret på en vågvektor k från gitterpunkten är

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} - G^2 = 0$$

\uparrow $k' = k'$
 \uparrow $k' = k - G_{hkl}$

Uppfyller k detta villkor ligger den vid Brillouin-zongränsen. Om den har samma riktning som den reciproka gittervektorn G så ska den ha beloppet π/a . En fonon med en vågvektor vid Brillouin-zongränsen representerar en stående våg. Alla elastiska vågor i en kristall kan representeras med vågvektorer inom den första zonen; detta på grund av att det är atomerna som bär vibrationen.

8. Hur kan man mäta fonondispersion? (126-128)

Fonondispersionsförhållanden $\omega(K)$ mäts oftast genom oelastisk spridning av neutroner. För denna process gäller

$$\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \pm \mathbf{K}$$

där K är vågvektorn för den fonon som skapats (+) eller absorberats (-), och G som vanligt är en reciprok gittervektor. G väljs så att K ligger i den första Brillouin-zonen. Förutom detta krav har vi även energikonservering som vi kan använda för att mäta dispersionen:

$$\frac{(\hbar k)^2}{2M_n} = \frac{(\hbar k')^2}{2M_n} \pm \hbar\omega$$

där M_n är neutronmassan och ω vinkelfrekvensen hos den skapade fononen.

9. Vad menas med en Umklapp-process? I vilket sammanhang har den betydelse? 131-133

En Umklapp process är en fonon-fonon kollision där den resulterande fononen är för lång för att få plats i den första Brillouin-zonen och måste därför projiceras in dit med en reciprok gittervektor. Dessa processer är vanliga vid höga temperaturer då alla fononmoder är exiterade.

Även elektron-fonon kollisioner kan vara Umklapp-processer. *Kan användas i s.k. Raman-spektroskopi*
 IN Elastisk fonon-fonon kollision (både och) = Umklapp process.

10. Till vilka storheter är Debye-temperaturen θ nära relaterad. Ge exempel på ämnen med höga respektive låga Debye-temperaturer. $\hbar\omega_D = k\theta_D$

Debye-temperaturen är relaterad till den totala energin hos fononerna i en kristall, samt den del av värmekapacitiviteten som fononerna orsakar. Ju lägre Debye-temperatur desto större är fononenergin och värmekapacitiviteten.

Några Debye-temperaturer

K	91 K
Rb	56 K
Cs	38 K
Be	1440 K
Cr	630 K
Ru	600 K
Os	500 K

11. Utgå från $K=1/3 C \langle v \rangle \lambda$ för att visa hur fononbidraget till den termiska ledningsförmågan kan väntas bero av temperaturen.

Då temperaturen är högre än Debye-temperaturen är värmekapacitiviteten approximativt konstant. Vi får samtidigt allt kortare fononvåglängder. Sammantaget leder detta till att K minskar.

Då temperaturen är låg har vi få exiterade fononer och långa fononvåglängder. Ju lägre temperatur desto mindre minskar våglängderna med temperaturen, och då $T \rightarrow 0$ fås $K \propto T^3$.

Vid måttliga temperaturer måste alltså K ha ett maximum.

Elektrongasen

1. Visa att Fermi-vågvektorn för N stycken fria elektroner i en kristall med volym V ges av relationen $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$. Ge numeriskt värde på k_F för några metaller.

Antal tillstånd i intervallet $[k, k + dk]$ ges av

Sfer i k -rummet fylld: $N = 2 \cdot \frac{V}{8\pi^3} \cdot \frac{4\pi k_F^3}{3}$

$$\frac{dN}{dk} = 2 \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk$$

Fermi-nivån definieras ung. som den sista nivå som fylls då alla elektroner har placerats in i kristallen. För N elektroner har vi då

$$N = \int_0^{k_f} \frac{V}{\pi^2} k^2 dk = \frac{V k^3}{3\pi^2} \rightarrow k^3 = \frac{3\pi^2 N}{V}$$

vilket direkt ger den sökta relationen.

3. Vad menas med energiband? Visa att tillståndstätheten $N(E) \propto \sqrt{E}$ för frielektrongasen och att vid Fermi-nivån gäller $N(E_F) = 3/2 n_0/E_F$. I vilka enheter kan $N(E_F)$ anges?

Elektroner i en kristall är uppdelade i energiband. Dessa band är åtskilda med energiområden där det inte finns några tillåtna orbitaler för elektronerna, s.k. energigap. För fria elektroner har vi inte sådana gap, vilket ges ur

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} \rightarrow \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$

Genom att logaritmera den första termen ovan fås

$$\ln N = \frac{3}{2} \ln E + \text{konst.}$$

som kan deriveras och ger då

$$\frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{dE}{E} \rightarrow \frac{dN}{dE} = D(E) = \frac{3N}{2E}$$

som tillståndstätheten vid Fermi-nivån. Tillståndstätheten anges som antalet tillstånd per energienhet, alternativt per frekvensenhet eller per vågvektorenhet.

3. Visa att fri-elektrongasen kan svänga med egenfrekvensen ω_p där $\omega_p^2 = ne^2/\epsilon_0 m$.

Då elektrongasen rör sig mot en bakgrund av fixa positiva laddningar, jonerna, uppkommer en polarisering på grund av täthetsfluktuationer som kan skrivas $P = -ne\bar{\Delta}$. Eftersom elektrongasen är neutral så har vi även att $0 = \epsilon_0 E + P$. Rörelseekvationen för en elektron i täthetsfluktuationerna blir då

$$m \frac{d^2 \bar{\Delta}}{dt^2} = - \frac{ne^2}{\epsilon_0} \bar{\Delta}$$

vilket kan ses som ekvationen för en harmonisk oscillator med frekvensen

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

4. Visa att för elektronbidraget till specifika värmekapacitet gäller att $C_e \propto N(E_F) k_B^2 T$.

Man skulle kunna tro att elektronbidraget till värmekapacitet är $3/2 k_B$, men så är det inte. Det gäller om det är så att alla elektroner tar upp energi, men i verkligheten så tar bara en liten andel av elektronerna upp energi, nämligen de som ligger i ett $k_B T$ stort energiband runt Fermienergin. Dessa elektroner tar själva upp en energi av storleksordningen $k_B T$. Om N är det totala antalet elektroner så innebär det att bara NT/T_F kan existera termiskt vid temperaturen T . Dessa elektroner har då energin

$$U \approx \frac{NT}{T_F} k_B T$$

vilket vi kan derivera m.a.p. temperaturen för att få värmekapacitiveteten

$$C_d = \frac{\partial U}{\partial T} \approx Nk_B \frac{T}{T_F} = \frac{2}{3} k_B^2 N(E_F) T.$$

5. Vad menas med effektiv termisk massa?

Man jämför de verkliga värdena på värmekapacitiveteten i materialet med de som man får i frielektronmodellen. Man definierar då en effektiv termisk massa

$$\frac{m_{th}}{m} = \frac{\gamma_{observerad}}{\gamma_{frielektron}}$$

Kvoten ovan är inte ett på grund av tre olika effekter

- Växelverkan mellan ledningselektronerna och gittrets periodiska potential. Den effektiva massa man talar om här kallas bandeffektiv massa.
- Växelverkan mellan ledningselektronerna och fononer. En elektron polariserar och/eller förvrider gittret runt omkring (t.ex. så drar en elektron i rörelse ihop jonerna som den passerar mellan), och får därigenom en större effektiv massa.
- Växelverkan mellan ledningselektronerna själva. En elektron i rörelse orsakar en tröghetsreaktion hos elektronerna i omgivningen och får därför en större effektiv massa.

6. Härled ett uttryck för den paramagnetiska susceptibiliteten hos frielektrongasen (Pauli-paramagnetism).

Varje ledningselektron har ett associerat magnetiskt moment på en Bohrmagneton. Detta borde leda till ett paramagnetiskt bidrag till magnetiseringen av materialet

$$M = \frac{N\mu_B^2 B}{k_B T}$$

Den borde alltså bero på temperaturen. Något sådant beroende kan man dock inte se. Det gäller ungefär samma sak här som när man räknar på elektronbidraget till värmekapacitiveteten, nämligen att bara elektroner inom ett $k_B T$ stort område runt Fermienergin kan växelverka med det pålagda yttre fältet. Magnetiseringen ovan skulle inträda om alla elektroner orienterade sig parallellt för att konstruktivt bidra med sitt magnetiska moment. Men: då bara en liten andel av elektronerna kan växelverka så är resten "slumpmässigt" orienterade och deras bidrag tar ut varandra. Kvar blir bidraget från en T/T_F stor andel av elektronerna.

$$M = \frac{N\mu_B^2 B}{k_B T} \frac{T}{T_F} = \frac{N\mu_B^2 B}{k_B T_F}$$

$$\cancel{\frac{N\mu_B^2 B}{k_B T}} \frac{T}{T_F} = \frac{M}{B}$$

7. Härled ett uttryck för elektriska konduktiviteten för frielektrongasen i ett statiskt fält.

Rörelsemängden för en fri elektron är relaterad till vågvektorn för densamma med $m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}$. I ett yttre pålagt fält kan vi skriva kraften på partikeln som

$$F = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -eE$$

där vi för enkelhetens skull satt magnetiseringen till noll. Om inga kollisioner inträffar så kommer alltså Fermisfären att förflyttas med konstant hastighet av ett statiskt fält. Integration m.a.p. tiden ger

$$E(t) - k(0) = -eEt/\hbar.$$

Dessvärre kommer elektronerna att kollidera med dels fononer och dels med olika defekter hos gittret (som stör den periodiska potentialen så att den inte längre är transparent för elektronerna). Vi inför nu en medeltid τ mellan dessa kollisioner för en elektron, så att en karakteristisk hastighet hos elektronerna blir

$$\bar{v} = -\frac{eE\tau}{m}.$$

Sätter vi antalet ledningselektroner per volymenhet som konstant $= n$ får vi ett uttryck för strömtätheten:

$$\bar{j} = nq\bar{v} = \frac{ne^2\tau}{m} \bar{E}.$$

I ovanstående uttryck kan vi direkt identifiera konduktiviteten

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

8. Härled ett uttryck för elektriska konduktiviteten för frielektrongasen i ett tidberoende fält.

Vi antar här ett tidsberoende hos fältet så att

$$E = E_0 e^{i\omega t}.$$

Insatt i uttrycket för strömtätheten ger det

$$\bar{j} = \frac{ne^2}{m\tau} E_0 e^{i\omega t} = \frac{ne^2}{m\tau} E_0 \frac{1}{e^{-i\omega t}} \approx \frac{ne^2}{m\tau} E_0 \frac{1}{1 - i\omega\tau},$$

vilket i sin tur ger ett uttryck för konduktiviteten i ett tidsberoende fält

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

9. Visa att reflektansen, vid vinkelrätt infall, för en perfekt ledande elektrongas blir $R \approx 1$ om $\omega < \omega_p$. Vad händer med R då $\omega > \omega_p$?

Den dielektriska funktionen definieras som

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}.$$

Vid vinkelrätt infall är brytningsindex n och dämpningskoefficienten K relaterade till reflektivitetskoefficienten r som

$$r(\omega) = \frac{n + iK - 1}{n + iK + 1}.$$

Definitionsmsätt är $\sqrt{\epsilon(\omega)} = n(\omega) + iK(\omega) = N(\omega)$.

$\omega < \omega_p$:

I detta fall blir N rent imaginär och n noll.

$$r(\omega) = \frac{1 - iK}{1 + iK} \rightarrow R(\omega) = |r(\omega)|^2 = \left| \frac{1 - iK}{1 + iK} \right|^2 = 1$$

$\omega > \omega_p$:

I detta fall blir N reell och K noll.

$$R(\omega) = \left| \frac{n - 1}{n + 1} \right|^2$$

10. Hur kan plasmonenergin för en metall bestämmas experimentellt?

Man kan excitera en plasmon i en tunn metallfilm genom att skicka en elektron genom den, alternativt reflektera en elektron från filmen. Elektronens energiförlust kommer att vara heltalsmultipler av plasmonenergin.

11. Härled ett uttryck för Hallkonstanten för frielektrongasen.

Hallfältet är det transversella E-fält som skapas då ström leds genom en stav i närvaro av ett yttre magnetfält. Laddningsbärarna påverkas av en Lorentzkraft i sidled. Då ström inte tillåts flyta ut ur stavens sidor har vi $\delta v_y = 0$ vilket bara är möjligt om vi har ett motriktat fält

$$E_y = -\frac{eB\tau}{m} E_x$$

Vi definierar nu Hall koefficienten som

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B}$$

vilket tillsammans med $j_x = \sigma E_x$ ger

$$R_H = -\frac{1}{ne}$$

12. Utgå från $K = 1/3 C_e \langle v \rangle \lambda$ och härled ett uttryck för frielektrongasens termiska ledningsförmåga. Ge också ett uttryck för förhållandet mellan termiska och elektriska ledningsförmågan (Lorenztalet).

Insättning av uttrycket för C_{el} och $\epsilon_F = 1/2 m v_F^2$ ger

$$K_{el} = \frac{\pi^2 n k_B^2 T}{3 m v_F^2} \frac{1}{\lambda} = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau}{3 m}$$

Lorenztalet definieras som

$$L \equiv \frac{K}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$$

Elektriband, elektroniska egenskaper

1. Förklara hur bandgap uppkommer vid en Brillouinzongräns. Härled ett uttryck för bandgapets storlek uttryckt i potentiella energin.

Vi har tidigare sett hur vågvektorer för fononer vid Brillouinzongränsen representerar stående vågor. Detta gäller inte bara fononer, vilket kan ses genom att betrakta uttrycket för Bragg-reflektion. Vid Bragg-reflektion har vi alltså inte vandrande vågor $\exp(i\pi x/a)$ och $\exp(-i\pi x/a)$ i materialet. Den tidsberoende tillståndsfunktionen representeras av stående vågor. Vi kan bilda två lösningar ur $\exp(i\pi x/a)$ och $\exp(-i\pi x/a)$:

$$\begin{aligned}\psi_+ &= \exp(i\pi x/a) + \exp(-i\pi x/a) = 2 \cos(\pi x/a) - \text{högar vid pos. jon} \\ \psi_- &= \exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a) = 2i \sin(\pi x/a) - \text{högar mellan}\end{aligned}$$

Tecknen jämte ψ betecknar om vågfunktionen är udda eller jämn. Dessa två vågfunktioner driver ihop högar med elektroner på olika ställen. Den jämna (+) lägger högar vid de positiva jonerna och minskar därigenom den potentiella energin. Den udda (-) lägger högar mitt emellan de positiva jonerna och ökar därigenom den potentiella energin. Det är detta som leder till ett bandgap:

- Man börjar med ett lågt k och en nästan fri elektron. Energin bestäms med $E = \hbar^2 k^2 / 2m$.
- När man ökar k närmar man sig Brillouinzongränsen $\pm\pi/a$. Energin tar det lugnt och vi kommer att hamna på ψ_+ .
- Vill vi öka k ytterligare måste vi tillföra energiskillnaden mellan ψ_+ och ψ_- , energigapet.

Energigapets storlek kan uttryckas i den potentiella energin. Vi börjar med att teckna just den potentiella energin:

$$U(x) = U \cos(2\pi x/a).$$

Energiskillnaden kan då skrivas som

$$E_g = \int_0^1 U(x) [\psi_+ - \psi_-]^2 dx = U.$$

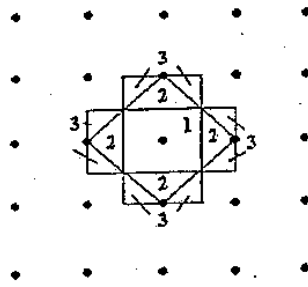
2. Vad menas med reducerat zonschema?

I ett reducerat zonschema ritas man bara den första Brillouinzonen. Vågvektorer som hamnar utanför den projiceras man in i 1:a zonen med reciproka gittervektorer G .

3. Hur skiljer sig elektronstrukturen i en metall från den i en isolator?

I tre dimensioner finns det $2N$ oberoende orbitaler i varje energiband. Om varje cell innehåller en valenselektron så blir bandet halvfyllt, vilket leder till att materialet leder. Om varje cell innehåller två valenselektroner blir bandet helt fullt och materialet leder inte. Det är alltså antalet elektroner per (primitiv-)cell som är viktigt, inte antalet elektroner per atom.

4. Ett ämne har sina atomer placerade i ett tvådimensionellt kvadratisk gitter. Rita de första Brillouinzonerna för detta ämne.



Figur 9.5 i Kittel.

5. Rita in Fermi-cirkarna för 1, 2 respektive 3 valenselektroner i zonstrukturen i föregående uppgift. Vilken inverkan har en svag gitterpotential på Fermi-cirkarna?

Varje Brillouinzon har den totala arean $4\pi^2/a^2$. Cirkarna ska ritas in centrerade runt mittpunkten med radie k_F . För en, två respektive tre valenselektroner fås

$$k_F = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\pi}{a} \right), \quad k_F = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\pi}{a} \right) \quad \text{och} \quad k_F = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \left(\frac{\pi}{a} \right)$$

En svag gitterpotential gör att Fermi-cirkarna inte längre är cirklar utan svagt deformerade. Om vi får bandgap så kommer de att pressas så att man så långt som möjligt fyller de lägsta Brillouinzonerna. Det är viktigt att komma ihåg att Fermi-cirkarna representerar linjer med konstant energi.

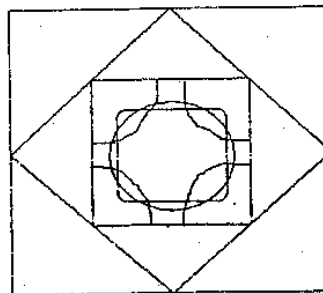
6. Beskriv hur man kan finna de karakteristiska dragen hos bandstrukturen för en frielektronliknande metall genom konstruktionen med tomma gittret. Hur modifieras bandstrukturen om man gör beräkningar med en mera realistisk potential?

Vi börjar med en vågvektor k' . Vi söker nu ett G så att k ligger i första Brillouinzonen och uppfyller $k + G = k'$. Energin kan nu för den fria elektronen skrivas som

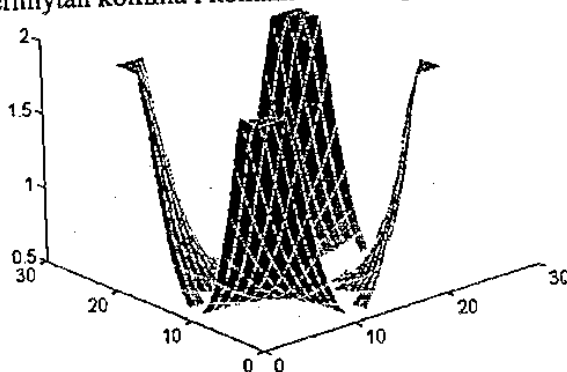
$$\epsilon(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x + G_x)^2 + (k_y + G_y)^2 + (k_z + G_z)^2 \right].$$

Se figur 7.8 i Kittel. Om man inför en potential så kommer $E(k)$ att avvika vid zongränserna.

7. Visa med en figur hur Fermi-ytan för Na kan förväntas avvika från en sfär. Bandgapen i Na är små och banden är fri-elektronlika utom närmast zongränserna. Uppskatta hur stort bandgapet skulle vara förutsatt att Fermiytan skulle komma i kontakt med Brillouinzungränsen. Na har en bcc-struktur med gitterkonstanten 4.2\AA .



För att Fermiytan ska förbli en yta med konstant energi så måste lite av tillstånden längs cirkelns kant halka närmre zongränsen, som ju har ganska låg energi. Om bandgapet är tillräckligt stort kan Fermiytan komma i kontakt med zongränsen.



Varför det blir så kan beskrivas lite med ovanstående figur. Går du längs en cirkel (rund), kommer du att komma till områden med omväxlande hög och låg energi, där de områdena med låg energi är de som är närmst zongränsen.

8. Hur kan man få experimentell information om $E(k)$? [232-241]

Optisk spektroskopi är en viktig metod för att bestämma bandstruktur hos olika material. För en foton som absorberats över en bandgräns gäller

$$\hbar\omega = \varepsilon_c(\vec{k}) - \varepsilon_v(\vec{k})$$

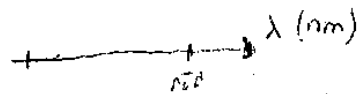
där c (conduction) är ett tomt band och v (valence) är ett fullt band. Tre saker kan förklara ett spektra:

- Bred kontinuerlig struktur kan deriveras m.a.p. våglängd, E-fält, temperatur eller tryck, Detta kallas modulationsspektroskopi.
- Man kan få spikar i spektrat p.g.a. att för vissa punkter blir den totala tillståndstätheten $D_c(\varepsilon_v + \hbar\omega)D_v(\omega)$ singular, nämligen vid frekvenser då vi har

$$\nabla_{\vec{k}}[\varepsilon_c(\vec{k}) - \varepsilon_v(\vec{k})] = 0.$$

- Man kan använda en 'pseudopotential' metod för att beräkna energiband. Beräkningarna ger lägen i Brillouin zonen för extrem- och skärningspunkter i modulationsspektra. Dessa kan användas för att identifiera dessa i de experimentella resultaten. Vidare kan sedan potentialen förbättras m.h.a. experimentet.

9. Varför är koppar röd?



Den längsta våglängden som kan absorberas av koppar i det optiska området motsvarar en övergång från högst upp i d-bandet (som är fyllt och ligger under Fermi nivå) upp till Fermi nivå. Detta avstånd är i koppar 2.0 eV, vilket motsvarar $\lambda = 620$ nm. Kortare våglängder absorberas; längre reflekteras. Det är de reflekterade våglängderna som vi ser, alltså är koppar rött.

10. Vilka fysikaliska egenskaper är förknippade med hög tillståndstäthet vid Fermi nivå?

- C_v^{el} starkt linjärt beroende av temperaturen.

Bly ex. nära ferromagnetiskt, $N(\epsilon_F)$ stort

- Start paramagnetism (hos övergångselement).

49, 255, 261

11. Förklara varför resistiviteten hos en metall är temperaturberoende. Beskriv särskilt temperaturberoendet ovanför Debyetemperaturen och vid mycket låga temperaturer.

Temperaturberoendet för resistiviteten hos en metall beror till stor del (enbart?) på elektron-fonon interaktion. Elektronerna sprids av fononerna. Ju högre temperatur desto fler fononer och därigenom större spridning vilket ger högre resistivitet.

Ovanför Debyetemperaturen är antalet termiska fononer ungefär proportionellt mot temperaturen, och resistiviteten är ungefär linjärt temperaturberoende för metaller i detta temperaturområde.

Vid mycket låga temperaturer, med mycket få fononer, är det nästan uteslutande kollisioner mellan elektroner och gitterdefekter som ger upphov till resistiviteten. Därför är den ganska temperaturoberoende nära den absoluta nollpunkten. (nära konstant)

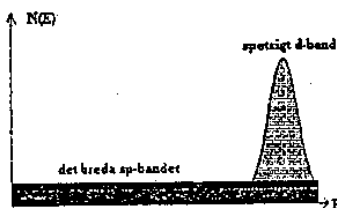
12. Beskriv hur energibandens utseende vid Fermivån inverkar på en metalls elektriska ledningsförmåga. 156

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

Generellt sett har vi att ju fler elektroner (större n) runt Fermivån desto större ledningsförmåga. Detta räcker oftast inte med att konstatera detta tyvärr. Om valensbandet är smalt får elektronerna en hög effektiv massa. Här talar man om effektiv bandmassa. Den går som

$$m^* \propto \left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$$

Nära Brillouinzongränsen får elektronerna t.o.m. negativ massa, vilket speglar den ökande sannolikheten för Bragg-reflektion för k nära zongränser. Hög effektiv massa är vanligt bland övergångsmetallerna vilket gör att de inte är goda ledare även om de har många elektroner kring Fermivån (den ligger smack mitt i d-bandet för dessa ämnen).



Detta kan dock inte riktigt förklara den dåliga ledningsförmågan hos övergångsmetallerna. De har nämligen ett brett sp-band som innehåller måttliga mängder elektroner. Koppar och kalium t.ex. har en Fermiyta nästan helt bestående av elektroner i ett sp-band samtidigt som de har god ledningsförmåga. I dessa ämnen ligger d-bandet under Fermivån.

Svaret ligger i att då sp-elektronerna kolliderar med fononer eller defekter (som begränsar konduktiviteten) så åker de in i d-bandet och irrar runt lite innan de återigen hamnar i en ledande position, dvs i sp-bandet. Detta leder till en mycket längre relaxation mellan kollisioner och därför en högre resistans.

13. Härled uttrycket för effektiva massan hos en elektron i periodisk potential.

Vi utgår från en elektrons rörelseekvation i ett energiband. Antag att elektronen beskrivs av ett vågpaket bestående av vågfunktioner nära en vågvektor k . Gruppshastigheten ges då av

$$v_g = \hbar^{-1} d\varepsilon/dk \Leftrightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad \varepsilon = \omega\hbar$$

Gittrets inverkan på hastigheten upp bärs av dispersionsrelationen. Genom att derivera ovanstående m.a.p tiden får vi

$$\frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{d^2\varepsilon}{dkdt} = \hbar^{-1} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \hbar^{-2} F \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \quad \text{alt.} \quad \frac{dk}{dt} = \hbar \frac{d\omega}{d\varepsilon} \cdot \frac{1}{d^2\varepsilon/dk^2}$$

Skriver vi detta på formen

$$F = \frac{\hbar^2}{d^2\varepsilon/dk^2} \frac{dv_g}{dt}$$

kan vi identifiera massan i Newtons andra (?) lag:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2\varepsilon/dk^2}$$

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \delta E &= F \delta x = F v_g \delta t = F \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \delta t \\ \textcircled{2} \delta E &= \frac{dE}{dk} \delta k \\ \textcircled{1} + \textcircled{2} &\Rightarrow F = \hbar \frac{dk}{dt} \end{aligned}$$

14. Hur beskrivs ledningsegenskaperna hos ett energiband med ett tomt elektrontillstånd?

Med hål.

15. Förklara varför Hallkonstanten i en metall kan avvika avsevärt från frielektronvärdet.

Om en del av laddningsbärarna är hål resulterar det i ett helt annat värde än för fria elektroner. Över huvud taget beror avvikelserna på att frielektronmodellen ej fungerar. Med bandteori kan Halleffekten förklaras bättre.

16. Inför begreppet "hål", dvs beskriv egenskaperna för ett energiband med ett tomt tillstånd.

En vakant orbital i ett band kallas ett hål. Ett hål reagerar på yttre fält som om det hade massa och en positiv laddning $+e$.

1. Den totala vågvektorn för alla elektroner i ett fyllt band är noll p.g.a. symmetri (Brillouin zonen har stor symmetrigrad om rumsgittret har det). Om vi nu tar bort en elektron med vågvektorn k_e kommer bandet att ha totala vågvektorn $-k_e$. Denna skillnad tillskrivs det nu uppkomna hålet, som sägs ha vågvektorn $k_h = -k_e$. Man brukar dock rita in hålet som om det fanns vid k_e .
2. För energin gäller $\varepsilon_h(\bar{k}_h) = -\varepsilon_e(\bar{k}_e)$.
3. För hastigheten gäller $v_h = v_e$.
4. För de effektiva massorna gäller $m_h = -m_e$.
5. Insatt i rörelseekvationen ger det att hålet uppför sig som en partikel med positiv laddning $+e$.

5. Ställ upp de samband ur vilka man kan erhålla antalet hål i valensbandet och antalet elektroner i ledningsbandet i en dopad halvledare.

Vi inför beteckningen E_d . Det är jonisationsenergin för störatomerna, och donatornivån ligger E_d under ledningsbandet. Vidare antar vi att de extrinsiska elektronerna, dvs de som kommer från störatomerna, vida överstiger de intrinsiska. Man kan säga (Myers s.303) att när man har stor täthet av donatorelektroner så rekombinerar de intrinsiska hålen och elektronerna. Det återstår då så gott som enbart störatomelektroner, så vi får

$$n \approx N_{d^+},$$

där N_{d^+} är antalet joniserade störatomer. Vi kan nu säga att antalet fortfarande neutrala störatomer är lika med antalet elektroner med energi $E_g - E_d$, dvs i ledningsbandet. Det ger

$$N_{d^0} = N_d - N_{d^+} = N_d f(E_g - E_d),$$

som vi kan utveckla till

$$n = \frac{N_d}{e^{(\mu - E_g + E_d)/k_B T} + 1}$$

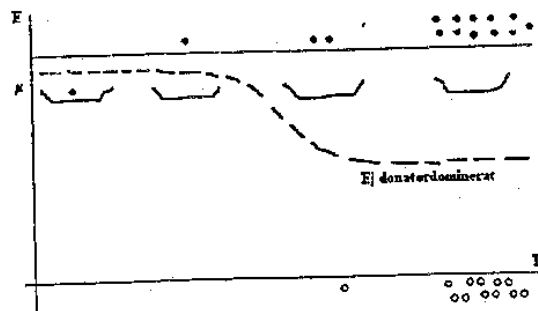
Notera att den tidigare relationen

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

fortfarande gäller. Detta ger oss ett krav på μ . Vid låga temperaturer kan man förenkla detta kravet till

$$\mu = E_g - \frac{1}{2} E_d + \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{N_d}{n_0}.$$

Vid mycket låga temperaturer ligger Fermi-nivån som tidigare sagts mitt emellan donatornivån och ledningsbandet, men vid högre temperaturer (högre ju större bandgap vi har) så försvinner beroendet på dopningen och Fermi-nivån ligger mitt i bandgapet. Nedan fig 10.14 i Myers:



6. Vilket temperaturberoende har elektrontätheten i en donatordopad halvledare?

Man kan som sagt kombinera de två uttrycken för n:

$$n = \frac{N_d}{e^{(\mu - E_g + E_d)/k_B T} + 1} \text{ och } n = n_0 e^{(\mu - E_g)/k_B T}. \text{ Då erhålls}$$

$$n = (n_0 N_d)^{1/2} e^{-E_d/2k_B T}, \text{ som ger det sökta temperaturberoendet vid låga temperaturer.}$$

Vid höga temperaturer dominerar den intrinsiska laddningsbärartätheten, som har samma utseende: $n = n_0 e^{(\mu - E_g)/k_B T}$.

Halvledare

280, 283-284

1. Beskriv två metoder att bestämma bandgapet i en halvledare.

De bästa värdena ges med *optisk absorption*. Då man tar upp ett absorptionspektrum för en halvledare finner man att över en viss frekvens får man absorption för ett kontinuerligt frekvensområde. Denna brytfrekvens ger det direkta bandgapets storlek. Bandgapet kan också bestämmas genom att studera konduktivitetens temperaturberoende eller laddningsbärartätheten i 'intrinsic range'.

2. Beskriv hur donator- respektive acceptornivåernas läge i en dopad halvledare kan bestämmas. Hur avgör man vilket slags laddningsbärare som dominerar? 289-291

Om ledningsförmågan domineras av donatoratomer så ligger Fermi-nivån vid låga temperaturer mellan donatornivåerna och kanten på ledningsbandet. Har vi istället acceptoratomer så ligger nivån mellan acceptornivåerna och kanten på valensbandet. När $T = 0$ ligger nivån precis mitt emellan dessa nivåer. Hallspänningens tecken är en grov uppskattning om vilket slags laddningsbärare som dominerar. Man kan också använda sig av den termoelektriska potentialen. Genom att värma en ända av ett prov och studera tecknet på den uppkomna spänningen kan man avgöra om provet är n eller p -dopat.

3. Definiera mobiliteten för elektroner och hål. Hur kan koncentrationen av störatomer bestämmas?

Mobiliteten är storleken på drifhastigheten genom E-fältet.

$$\mu = \frac{v_d}{E}$$

Mobiliteten är positiv för både elektroner och hål trots att deras drifhastigheter har motsatta tecken. Om man har donatordopat någorlunda mycket är $N_{d+} \approx n$. Dessutom är nästan alla donatoratomer joniserade vid måttliga temperaturer. Då är alltså $N_d \approx n$. Kom ihåg att om man går för högt kommer den intrinsiska tätheten att börja ta överhanden, dvs $N_{d+} \approx n_i$, och man måste då även ta hänsyn till den. Var denna gräns går kan man räkna på.

4. Visa att np för en given halvledare är konstant oavsett dophalt.

Genom att kombinera uttrycken för elektron och håltätheten i en halvledare $n = n_0 e^{(\mu - E_g)/k_B T}$ och $p = p_0 e^{-\mu/k_B T}$ fås

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

Ovanstående uttryck gäller för jämviktskoncentrationerna för elektroner och hål. En viktig sak att komma ihåg är att vid normala dophalter är antalet störatomer försvinnande litet. De påverkar bara antalet ledningsbärare, inte bandstrukturen. Vi har också en bra formel:

$$n_0 = \left(\frac{2m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \approx 2.5 \cdot 10^{25}$$

Samma sak fast med hålmassan gäller för p_0 .

7. Redogör för en modell med vars hjälp man kan uppskatta jonisationsenergin för en donatoratom.

Då en donatoratom är i stånd att lämna ifrån sig en elektron kan vi se den som väteliknande. Då borde också jonisationsenergin uppföra sig som

$$E = \frac{e^4 m}{2(4\pi\epsilon_r \epsilon_0 \hbar)^2}$$

För isolerade väteatomer är dielektricitetskonstanten 1 och jonisationsenergin 13.6 eV. I ett halvledarmaterial är ϵ_r mycket högre än 1 och jonisationsenergin blir då mycket lägre. För t.ex. Ge är $\epsilon_r \approx 16$ och $E \approx 13.6/256 = 0.053$ eV.

Magnetism

1. Vad menas med diamagnetism, paramagnetism respektive ferromagnetism?

Den magnetiska susceptibiliteten är en dimensionslös storhet som definieras som

$$\chi = \frac{\mu_0 M}{B}, \text{ där } B \text{ är ett yttre pålagt magnetfält och } M \text{ är det resulterande inre fältet.}$$

- Diamagnetism. I diamagnetiska material är susceptibiliteten negativ. Kan liknas vid den dämpning i ström som man får då man först lägger spänning över en spole. Här har vi skillnaden att motströmmen löper utan resistans och alltså inte dör ut.
- Paramagnetism. I paramagnetiska material är susceptibiliteten positiv. Kommer sig av att om man har en atom med halvfylla elektronskal, så kan ett magnetiskt moment verka på dessa. De kommer då att ställa in sig med fältet.
- Ferromagnetism. Ett ferromagnetiskt material har en magnetisering även i frånvaro av ett yttre magnetfält.
kan ha. Det finns en kritisk temperatur under vilken spontan magnetisering sker (Curie-temperaturen).

2. Förklara varför 3d-övergångsmetallerna i många fall har lokaliserade magnetiska moment då de ingår i föreningar, som t.ex. Fe_3O_4 .

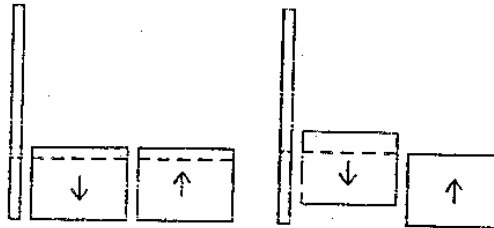
Metallerna vi pratar om är bl.a. Ti, V, Cr, Mn, Fe, Mn, Fe, Co, Ni och Cu. De återfinns i tabell 11.2 i Myers. När dessa övergångsmetaller är joniserade, som i t.ex. Fe_3O_4 , får man inte det effektiva antalet Bohrmagnetoner p att stämma med formeln $p = g(J(J+1))^{1/2}$. De stämmer mycket bättre med $p = 2(S(S+1))^{1/2}$. Detta förklaras med att banrörelsemängdsmomentet inte kan växelverka med det yttre fältet. Det sägs vara utsläckt, eng. *quenched*. Detta kan i sin tur förklaras med de starka elektrostatiska fälten i närheten av jonerna, kristallfält. För 3d-ämnena är d-elektronerna starkt exponerade för detta fält, som då splittrar upp de förut degenererade L nivåerna. Separationen blir stor jämfört med $k_B T$ och $\mu_B H$, och nivåbesättningarna påverkas mycket lite av temperatur eller yttre fält.

Detta ger att det yttre fältet inte kan påverka besättningsnivåerna så att de med lägre magnetisk energi blir mer besatta. Nivåer med hög magnetisk energi är fortfarande lika besatta som de med låg magnetisk energi, och vi får inget samlat magnetiskt moment från banrörelsen. Däremot kommer fortfarande spinnmomentet att kunna påverkas så att vi får en magnetisering därifrån.

3. Hur kan man experimentellt bestämma magnetiska momentet hos paramagnetiska joner?

Spinn-pol fotoemission.

4. Redogör för hur ferromagnetismen hos Co, Fe och Ni kan förklaras med en bandmodell för 3d-elektronerna.



Figur 15.7 i Kittel.

Förklaringen grundar sig på två saker. Växelverkan mellan ett ybytesfält och 3d \downarrow sub-bandet gör att bandet lyfts upp i energi vid låga temperaturer (under Curie-temperaturen), se bilden till höger. Dessutom antar man att 4s bandet har ungefär lika många \uparrow som \downarrow . Detta leder till ett överskott av \uparrow och således till en magnetisering.

5. Vad är karakteristiskt för ett antiferromagnetiskt material?

I en antiferromagnet är spinnen motsatt riktade med noll nettomoment under en kritiskt temperatur, Néeltemperaturen T_N . Susceptibiliteten har en topp vid T_N .

6. Vad är magnoner? Hur kan de detekteras experimentellt?

En magnon är en kvantiserad spinnvåg, dvs en våg av riktade spinn som drar fram genom materialet. Dispersionsrelationen för magnoner lyder

$$\hbar\omega = 4JS(1 - \cos ka)$$

En neutron kan spridas inelastiskt av magnetisk struktur i ett material, med tillhörande emission eller absorption av en magnon; detta gör att vi kan detektera magnoner.

7. Ge en kvalitativ förklaring till uppkomsten av magnetiska domäner.

Sett till en mikroskopisk skala är spinnen i ett ferromagnetiskt material parallella under Curie-temperaturen. Makroskopiskt sett behöver det inte vara så. Det kan jämföras med olika enkristallkorn i en bit koppar. De ser ju på atomära avstånd ut precis som perfekta ordnade gitter. Uppkomsten för korn och domäner går till på likartade sätt. Ordnade strukturer uppträder slumpvis i materialet och sprider sig, eftersom det är fördelaktigt att sälla sig till mängden.

8. Redogör för Weiss modell för ferromagnetism.

Weiss modell, som också kallas medelfältapproximationen (mean field approximation), bygger på att varje atom i det paramagnetiska materialet upplever ett inducerat fält som är proportionellt mot magnetiseringen i materialet.

$$\vec{B}_E = \lambda \vec{M}.$$

Detta fält kallas utbytesfältet och kan sägas komma från en intern växelverkan som vill likrikta atomernas magnetiska moment. Denna växelverkan motarbetas av temperaturen och man inför en gräns, Curie-temperaturen T_c . Över denna gräns förtrycks växelverkan och ämnet blir dominerande paramagnetiskt.

Om vi befinner oss ovanför T_c blir magnetiseringen M

$$\mu_0 \vec{M} = \chi_p (\vec{B}_a + \vec{B}_c),$$

där χ_p är den paramagnetiska susceptibiliteten. Att $M = \chi B$ gäller bara om vi befinner oss i det paramagnetiska området. Sätter man in ovanstående i uttrycket för susceptibiliteten finner man att χ_p har en singularitet i T_c , vilket ger oss en tydlig fasövergång.

Om vi istället går till temperaturer under T_c så har vi en permanent magnetisering. Brillouinuttrycket för magnetiseringen av spin $\frac{1}{2}$ partiklar i ett λM fält är

$$M = N\mu \tanh\left(\frac{\mu\lambda M}{k_B T}\right).$$

Denna ekvation har lösningar för $M \neq 0$ i området 0 till T_c . Detta ger oss också en tydlig fasövergång vid T_c , nämligen att magnetiseringen försvinner. Fasövergången är ganska distinkt. Bl.a. används den för att temperaturreglera lödkolvar.

Dielektrika

1. Härled ett samband mellan polariserbarhet och dielektricitetskonstant.

Vi utgår från att en kristalls polarisering kan uttryckas som

$$P = \sum_j N_j \alpha_j E_{loc}(j),$$

där N är atomkoncentrationen och α är polariserbarheten. Vidare definierar vi den dielektriska konstanten ϵ som $\epsilon = 1 + \chi$. Om det lokala fältet E_{loc} ges av Lorentzsambandet

$$\vec{E}_{loc} = \vec{E} + \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}$$

så får vi

$$\chi = \frac{P}{E} = \frac{\sum_j N_j \alpha_j}{1 - \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_j N_j \alpha_j}$$

som kan omflyttas till

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_j N_j \alpha_j.$$