

Sammanfattning av föreläsning 1

Några av den moderna fysikens kanske viktigaste observationer ledde fram till den s.k. partikel-våg-dualismen; både ljus och partiklar (t.ex elektroner) har dels en vågnatur och dels en partikelnatur.

Den fotoelektriska effekten och Comptonspridning av ljus ledde till en beskrivning av ljus som partiklar (fotoner) med energi $E=hf$ och rörelsemängd $p=h/\lambda$. Plancks konstant $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js

Fotoelektriska effekten:

En foton med energin hf absorberas och exciterar en elektron med bindingsenergin E_b . Elektronen emitteras och får den kinetiska energin $K = hf - E_b - \phi$, där ϕ är materialets utträdesarbete. För elektroner vid Fermi-nivån gäller att $E_b = 0$ och dessa har den högsta möjliga kinetiska energin $K_{\max} = hf - \phi$

Comptonspridning:

En foton som kolliderar mot en elektron förlorar energi till elektronen (i form av kinetisk energi), så

att $\Delta E = \frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} = E_{\text{före}} - E_{\text{efter}} = K_e$. Compton noterade att energiförlusterna är riktningsberoende.

Han förklarade fenomenet genom att låta fotonen ha rörelsemängd, $p=h/\lambda$, och att rörelsemängden bevaras vid kollisionen. Det s.k. Comptonskiftet ges av uttrycket $\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$

Den listige fransmannen Louis deBroglie föreslog i sin avhandling 1923 att om ljus har partikelegenskaper så borde väl partiklar ha vågegenskaper: partiklar med rörelsemängd $p = mv$ har de

Broglievåglängden $\lambda = \frac{h}{mv}$.

Davison och Germer visade några år senare att han hade rätt, i ett experiment där man studerade elektrondiffraktion från ordnade ytor. de Broglie fick sedermera Nobelpriset i fysik.

Sammanfattning av föreläsning 2

En partikel med deBroglievåglängden λ (och vågvektorn $\mathbf{k}$ med beloppet $2\pi/\lambda$) beskrivs av vågfunktionen

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= A \sin(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t) \\ \text{eller } \Psi(\mathbf{r}, t) &= A \cos(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t) \\ \text{eller } \Psi(\mathbf{r}, t) &= A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}\end{aligned}$$

I en dimension byts $\mathbf{r}$ mot x

Vågfunktionen skall uppfylla

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

$$\text{randvillkoren; } \Psi \text{ och } \frac{d\Psi}{dx} \text{ ska vara kontinuerliga}$$

En partikels totala energi E ges av Schrödingerekvationen.

Sannolikheten att hitta en partikel i ett intervall dx runt punkten x ges av $P(x)dx = |\Psi(x)|^2 dx$

$$\text{Normeringskrav: } \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

Heisenbergs osäkerhetsrelationer

Eftersom vågfunktionen inte ger exakta svar utan sannolikhetsfördelningar finns det en gräns för hur noggrant en partikels "egenskaper" kan bestämmas. Den Nobelprisbelönade tyske fysikern Werner Heisenberg formulerade detta i sina berömda osäkerhetsrelationer.

Man kan inte samtidigt mäta en partikels läge och rörelsemängd med bättre noggrannhet än:

$$\Delta x \Delta p_x \sim \frac{\hbar}{2}$$

Det är omöjligt att bestämma ett systems energi under tidsintervallet Δt med bättre noggrannhet ΔE

$$\text{än: } \Delta E \Delta t \sim \frac{\hbar}{2}$$

För en partikel instängd i en endimensionell potentialgrop med sidan L , är tillåtna vågfunktioner

$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$. Energin associerad med dessa tillstånd ges av $E_n = \left(\frac{\hbar^2}{8mL^2}\right)n^2$, energin är kvantiserad, dvs endast vissa energier är möjliga.

Sammanfattning av föreläsning 3

I en ändligt djup (U) endimensionell potentialgrop med sidan L , vari en elektron har energin $E < U$ kan elektronen under korta stunder befinna sej utanför gropen.

Penetrationsdjupet

$$\delta = \frac{1}{C} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}}$$

En elektron med energin E som träffar en potentialbarriär $U > E$ och tjocklek L tunnlar igenom barriären med sannolikheten: $T \approx e^{-2CL}$, där $C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$

En elektron med energin E som träffar en potentialbarriär $U < E$ reflekteras med sannolikheten:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2, \text{ vågtalen i respektive område är } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ och } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}$$

I två resp. tre dimensioner skrivs Schrödingerekvationen:

$$2D \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) \Psi + U\Psi = E\Psi$$

$$3D \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi + U\Psi = E\Psi$$

I frielektronfallet, $U = 0$ inom $0 < x < L$ och $0 < y < L$ och $0 < z < L$, blir vågfunktionerna:

$$2D \quad \Psi(x, y) = A \sin\left(\frac{n_1\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{L}y\right)$$

$$3D \quad \Psi(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n_1\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{n_3\pi}{L}z\right)$$

Med energinivåer:

$$2D \quad E = \left(\frac{\hbar^2}{8mL^2}\right)(n_1^2 + n_2^2)$$

$$3D \quad E = \left(\frac{\hbar^2}{8mL^2}\right)(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Sammanfattning av föreläsning 4

Bohrs atommodell är den första kvantiserade atommodellen, den bygger på fyra postulat:

- 1) Elektroner rör sig i cirkulära banor runt atomkärnan under inverkan av Coulombkraften,

$$F(r) = \frac{k_e e^2}{r^2}$$

- 2) Endast vissa banor är stabila. I dessa emitteras ingen strålning.

- 3) Strålning, i form av ljus, emitteras då en elektron faller från en högre till en lägre bana. Omvänt för absorption. Om dessa banor har energi E_i och E_f har den emitterade fotonen energin: $hf = E_i - E_f$

- 4) Elektronbanornas radier ges av villkoret: $L = mvr = n\hbar$

Energien för en elektronnivå med kvanttalet n ges av $E_n = -\frac{k_e e^2}{2a_0 n^2} = -13.606 n^2 \text{ eV}$

Elektronbanans radie ges av $r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e k_e e^2} = a_0 n^2$, där a_0 är Bohr-radien $= 0.529 \text{ Å}$

Kvantmekanisk beskrivning av väteatomen.

Schrödingerekvationen i tre dimensioner: $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi + U\Psi = E\Psi$

Med en sfärsymmetrisk potential: $U = -k_e \frac{e^2}{r}$ skriver vi om ekvationen i sfäriska koordinater:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d^2 \Psi}{d\phi^2} \right) + U(r)\Psi = E\Psi$$

Variabelseparera så att: $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)F(\theta, \phi)$ och sätt in i Schrödingerekvationen:

$$F(\theta, \phi) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] R(r) + \frac{R(r)}{2mr^2} \hat{L}^2 F(\theta, \phi) = E \cdot R(r) \cdot F(\theta, \phi)$$

där $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\phi^2} \right)$

Med $F_{\ell, m}(\theta, \phi) = e^{im\phi} P_{\ell}^m(\cos \theta)$ blir $\hat{L}^2 F(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) F(\theta, \phi)$ och vi kan separera vinkelberoendet från radialekvationen.

Väteatomens kvanttal

Radialdelen av ekvationen ger **huvudkvantalet n** (samma som i Bohrmodellen) som antar värden 1, 2, 3, 4, som var och en definierar ett elektronskal. Dessa betecknas K, L, M, N, O, .. för n

$= 1, 2, 3, 4, 5$, Energin ges av: $E_n = -\frac{k_e e^2}{2a_0 n^2} = -\frac{13.606}{n^2} \text{ eV}$ (exakt som Bohr)

Rörelsemängdsmomentet L är associerat med **kvanttalet ℓ** som kan anta värden $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

Rörelsemängdsmomentet betecknas L och kan anta värden: $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ till skillnad från Bohrmodellen där $L = n\hbar$

Elektroner med samma n och ℓ bildar **subskal**, dessa betecknas: s, p, d, f, g, .. för $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$,

Från kombinationer av dessa kvanttal kan alla elektronnivåer skapas:

$n=1, \ell=0$	1s						
$n=2, \ell=0$	2s	$n=2, \ell=1$	2p				
$n=3, \ell=0$	3s	$n=3, \ell=1$	3p	$n=3, \ell=2$	3d		
$n=4, \ell=0$	4s	$n=4, \ell=1$	4p	$n=4, \ell=2$	4d	$n=4, \ell=3$	4f

Rymdkvantisering, det magnetiska kvanttalet

Det tredje kvanttalet betecknas m_ℓ , och ger projektionen L_z .

En elektron som snurrar i en cirkulär bana har ett magnetiskt moment $\mu = IA$, I strömmen och A är den inneslutna arean. $I = \frac{-ev}{2\pi r}$ och $A = \pi r^2 \Rightarrow$

$$\mu = \frac{-evr}{2} = \frac{-e\bar{L}}{2m} = \frac{-e\hbar}{2m} \sqrt{\ell(\ell+1)} = -\mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} \text{ där } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \text{ Bohr magnetonen.}$$

Ett magnetfält B (i z-led) växelverkar med μ och projicerar L på z-axeln, enligt $L_z = m_\ell \hbar$.
 m_ℓ antar heltalsvärden från $-\ell$ till ℓ .

Det magnetiska momentet i z-led från en elektron $\mu_{z,orb} = -m_\ell \mu_B$,

och för ett fyllt skal gäller $\mu_{z,orb} = \sum_{-\ell}^{\ell} -m_\ell \mu_B = 0$

Spinnkvanttalet

Det fjärde kvanttalet är elektronspinn, s som har värdet $1/2$. På samma sätt som för bankvanttalet ℓ är spinn associerat med ett rörelsemängdsmoment $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$.

Komponenten i z-led, ges av: $S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

Det magnetiska momentet $\bar{\mu}_{spinn} = -\frac{e}{m_e} \bar{S}$, i z-led blir det $\bar{\mu}_{spinn,z} = \pm \frac{e\hbar}{2m_e}$.

Sammanfattning av föreläsning 5

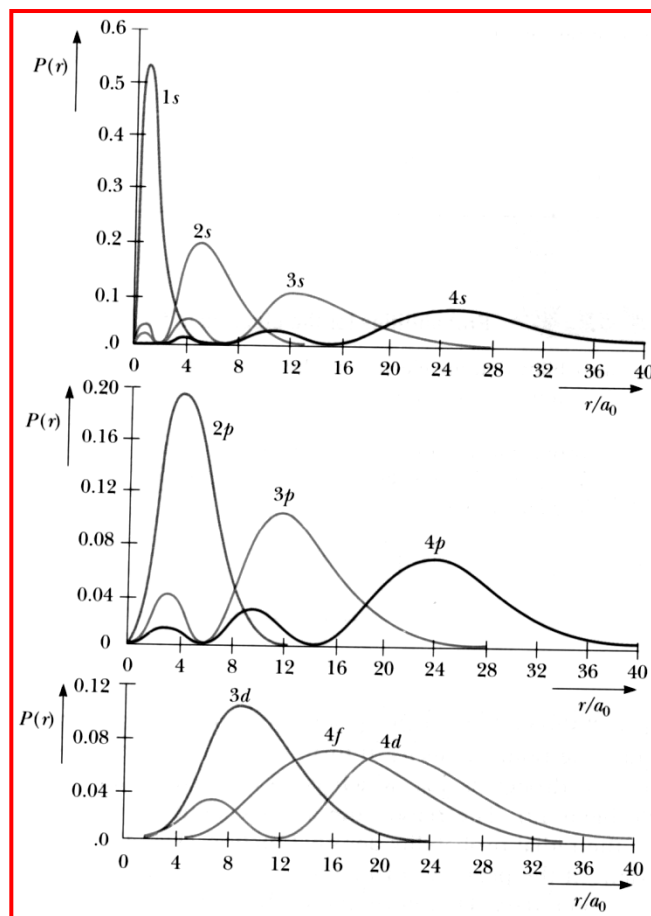
Väteatomens vågfunktioner, var hittar man elektronerna?

Den enklaste vågfunktionen skrivs $\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{\frac{-r}{a_0}}$.

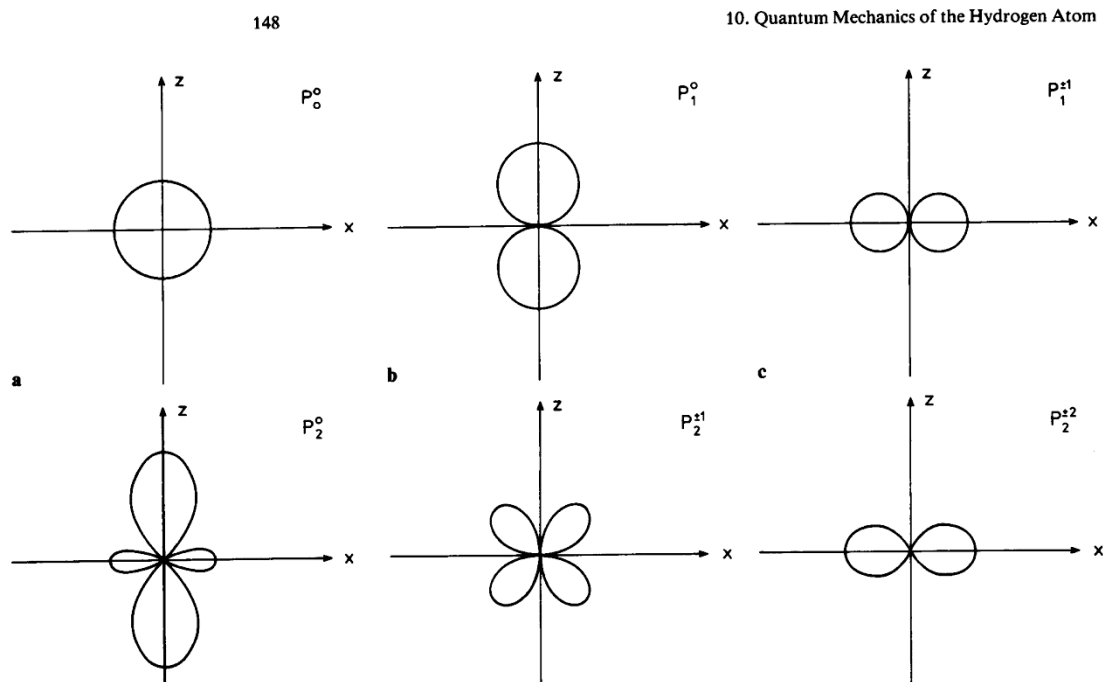
Den radiella elektronfördelningen ges av $P(r)dr = |\Psi(r)|^2 dV = |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 dr$.

Med $|\Psi_{1s}(r)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}}$ blir $P_{1s}(r) = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}}$

Radialfördelning för vätes vågfunktioner



Den vinkelberoende delen beskrivs av $F_{l,m}(\theta,\phi) = e^{i\phi m} P_l^m(\cos\theta)$ där $P_l^m(\cos\theta)$ är s.k. Legendrepolynom, som grafiskt beskrivs:

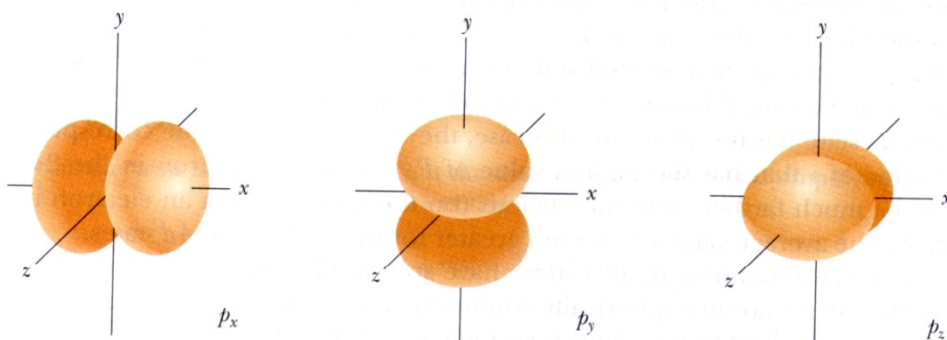


p-elektronernas vinkelberoende i 3D

För $\ell = 1$ (dvs p-elektroner) kan vågfunktionen delas upp i tre delar:

$\Psi_{2p_x} = xF(r)$ och $\Psi_{2p_y} = yF(r)$ och $\Psi_{2p_z} = zF(r)$ där $F(r)$ är en sfärsikt symmetrisk funktion

De riktade p-orbitalerna har stor betydelse för beskrivningen av riktade kemiska bindningar



Hur många elektroner får plats i ett elektronskal, hur bygger man olika atomer i det periodiska systemet?

I det periodiska systemet finns alla atomer representerade. Vad skiljer dem åt?

- 1) Antal elektroner. Dessa är laddade och laddningsneutralitet kräver att kärnan i de tyngre atomerna har mer laddning.



Kärnan består av Z laddade protoner och N neutrala neutroner: kärnpartiklar. Protonerna laddning är lika stor som elektronens, men positiv. I en neutral atom finns därför lika många protoner som elektroner.

Atomens massa $M \approx (Z + N)u$ där u är massan hos en kärnpartikel. $u = 1.66 \times 10^{-27}$ kg. Jämför elektronens massa 9×10^{-31} kg.

Atomer med samma Z men olika N är **isotoper** av samma atomslag.

Atomer där antalet protoner och elektroner inte överensstämmer kallas **joner**.

Olika atomer skiljer sej i Z och även antal elektroner.

Vilka regler gäller för att fylla på elektroner i skalerna? **Pauliprincipen** och **Hunds regler**

Pauliprincipen

Inga elektroner i samma atom kan ha exakt samma uppsättning kvanttal.

Kvanttalen är fyra: n , ℓ , m_ℓ , m_s .

$$n = 1, 2, 3,$$

$$\ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad s, p, d, f, \dots$$

$$m_\ell = -\ell, \dots, \ell$$

$$m_s = \pm 1/2$$

n	1	2	2	2	2	3	3	3	3	3	3	3	3	3
ℓ	0	0	1	1	1	0	1	1	1	2	2	2	2	2
m_ℓ	0	0	-1	0	1	0	-1	0	1	-2	-1	0	1	2
m_s	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$	$\pm 1/2$
n_e	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2

Antal elektronplatser per elektronskal blir då:

$$n=1, \text{ totalt } 2 \quad \text{varav } 2 \text{ i } 1s$$

$$n=2, \text{ totalt } 8 \quad \text{varav } 2 \text{ i } 2s \quad \text{och } 6 \text{ i } 2p$$

$$n=3, \text{ totalt } 18 \quad \text{varav } 2 \text{ i } 3s, \quad 6 \text{ i } 3p \quad \text{och } 10 \text{ i } 3d$$

Hunds regler

I ett subskal fylls elektroner så att ett maximalt antal elektroner har oparade spinn.

Atomspektra

Varje atomslag har sitt "eget" emissions/absorptionsspektrum med unika våglängder. Dessa ges av energiskillanden mellan inblandade nivåer.

Alla övergångar är inte tillåtna: urvalsregler $\Delta\ell = \pm 1$ och $\Delta m_\ell = \pm 1$

för att rörelsemängdsmomentet skall bevaras i processen måste fotonen, förutom energi och rörelsemängd, även ha rörelsemängdsmoment.

Uppskattning av energinivåer och röntgenemissionsenergier

För en-elektronatomer gäller: $E_n = -\frac{k_e e^2}{2a_0} \left(\frac{Z^2}{n^2}\right) = -\frac{13.6Z^2}{n^2}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{mk_e e Z e}$

För fler-elektronatomer ersätts Z med Z_{eff} som bestäms av hur många elektroner som skärmar kärnladdningen.

för K-elektroner är $Z_{\text{eff}} = Z-1$, för L-elektroner är $Z_{\text{eff}} = Z-2$ och för M-elektroner är $Z_{\text{eff}} = Z-2-8 = Z-10$

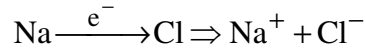
För att räkna ut röntgenemissionsenergin måste "hålet" tas med i beräkningen, dvs öka Z_{eff} med 1.

Metoden ger en hyfsad uppskattning av elektron/röntgenenergierna, men stämmer inte helt med experiment.

Sammanfattning föreläsning 6: kemisk bindning

Den kemiska bindningen mellan atomer i en fast kropp eller en molekyl spelar en avgörande roll för de elektriska, kemiska och optiska egenskaperna hos fastkroppen/molekylen.

Jonbindning: laddningsöverföring från atomer med ett fåtal valenselektroner till en atom med nästan fyllt yttre skal skapar joner. Ex. alkalimetaller och halogener



Na $\Rightarrow$ Na⁺ kostar **jonisationsenergin**,
Cl $\Rightarrow$ Cl⁻ ger en energivinst, **elektronaffiniteten**

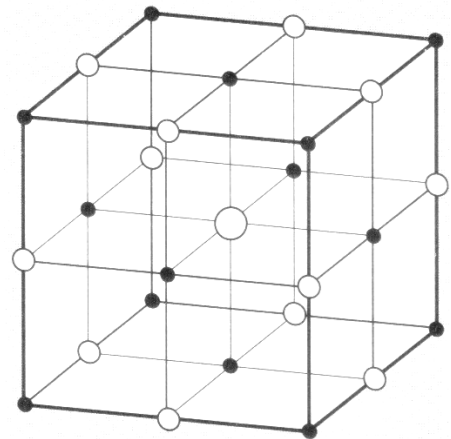
De laddade jonerna binds samman av Coulombkraften. Den totala attraktiva potentialen för en jon i en NaCl kristall ges av:

$$U = \frac{k_e e^2}{r_0} \left(-6 + \frac{12}{\sqrt{2}} - \frac{8}{3} + \dots \text{etc} \right) = -1.748 \frac{k_e e^2}{r_0} = -\alpha k_e \frac{e^2}{r_0}$$

α är **Madelungs konstant** = 1.748, r_0 är avståndet mellan positiva och negativa joner i strukturen

Vid korta avstånd överlappar jonernas elektronskal $\Rightarrow$ **elektrostatisk repulsion** och **Paulirepulsion**, som modelleras

av en repulsiv potential: $U_{\text{repul}} = \frac{B}{r_0^m}$



Den **joniska kohesivenergin** är den energi som krävs för att separera kristallen i joner.

Den **atomära kohesivenergin** är den energi som krävs för att separera kristallen i atomer.

Metallbindning: löst bundna elektroner avges till ett "elektronhav" som omger positiva joner i gittret. Bindningen sker då elektroner attraherar joner.

Många "nästan fria" elektroner ger god elektrisk ledningsförmåga, och god absorption och emission av ljus av många olika våglängder.

Kovalent bindning: elektroner delas mellan två atomer i en gemensam molekylorbital, mycket viktig bindning i molekyler. Överlapp mellan atomorbitaler splittrar dessa i bindande och anti-bindande molekylorbitaler, en per ingående atomorbital. I fasta material med många atomer splittras dessa till band, valensband och ledningsband separerade av ett bandgap, 5.5 eV för diamant, 1.1 eV för Si. Diamant, kisel och germanium binds alla av kovalenta bindningar, vars riktighetsberoende ger upphov till diamantstrukturen.

van der Waals bindning: växelverkan mellan dipoler.

vätebindning: växelverkan mellan positivt laddade vätejoner och negativt laddade joner i närliggande molekyler.

Is är vätebundet, med bindingsenergi ~ 0.1 eV per molekyl $\Rightarrow$ låg smältpunkt.

Sammanfattning föreläsning 7: rotationer och vibrationer

Molekylrotationer

En diatomär molekyl med bindningen längs x-axeln har **två rotationsfrihetsgrader**, runt y- och z-axlarna.

Molekylens atomer har massor m_1 och m_2 på avstånd r_1 och r_2 från rotationscentrum. Bindningsavståndet $r = r_1 + r_2$.

Om molekylens rotationsfrekvens betecknas ω , är atomernas hastigheter

$$\mathbf{v}_1 = \omega \mathbf{r}_1 \quad \text{och} \quad \mathbf{v}_2 = \omega \mathbf{r}_2$$

Molekylens **rörelsemängdsmoment $\mathbf{L}$** är: $L = m_1 v_1 r_1 + m_2 v_2 r_2 = (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega = I \omega$

Molekylens **rotationsenergi E_{rot}** är: $E_{\text{rot}} = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} = \{v_i = r_i \omega\} \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}$

I är molekylens tröghetsmoment $I = \mu r^2$, och μ är den reducerade massan. Precis som i fallet med elektronens rörelsemängdsmoment så är molekylens rörelsemängdsmoment kvantiserat enligt:

$L = I \omega = \sqrt{J(J+1)} \hbar$ vilket ger $E_{\text{rot}} = \frac{I \omega^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$ med **rotationskvanttalet** $J=0, 1, 2,$

Urvalsregler: Vid övergångar mellan olika nivåer emitteras eller absorberas fotoner så att $\Delta J = \pm 1$

Vibrationer

Två atomer hålls samman av en fjäder med fjäderkonstanten k . Om avståndet mellan atomerna ändras från jämviktsavståndet r_0 till $r_0 + x$, verkar en återförande kraft $F = -kx$ på atomerna. Enligt klassisk

mekanik är vibrationsfrekvensen $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$, k är fjäderkonstanten och μ är den reducerade massan.

Enligt kvantmekaniken är energin i ett vibrationstillstånd: $E_{\text{vib}} = (v + \frac{1}{2}) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = (v + \frac{1}{2}) h f$

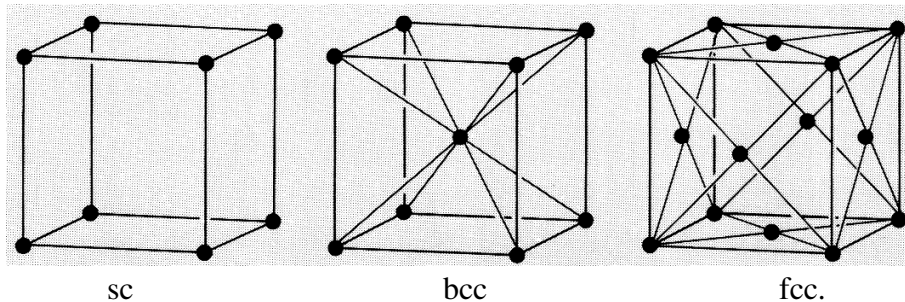
v är **vibrationskvanttalet** ($v = 0, 1, 2, 3, \dots$)

Övergångsregler $\Delta v = \pm 1$. Energiskillnaden vid en övergång är $\Delta E_{\text{vib}} = hf$

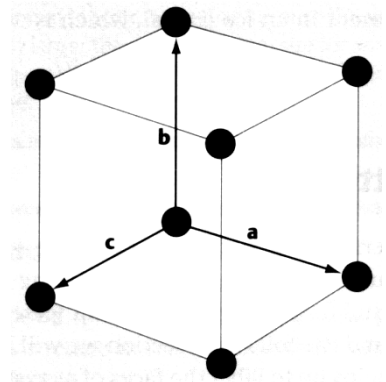
Sammanfattning av Föreläsning 8 och 9

I fasta material ordnar sej atomerna i s.k. kristallgitter. De strukturer vi stöter på i den här kursen är alla kubiska: "simple cubic" (sc), "body centered cubic" (bcc), "face centered cubic" (fcc), diamant, zink-blende och NaCl. Den näst sista beskriver de s.k. III-V halvledarmaterialen, t.ex. GaAs. Det är samma struktur som diamant, förutom att hälften av atomerna är från grupp III och hälften från grupp V i det periodiska systemet.

Nedan visas simple cubic (sc) eller enkel kubisk struktur, med en atom i varje hörn. Totalt innehåller varje kub en atom. I body centred cubic (bcc) ligger en atom i mitten av cellen, vilket ger totalt 2 atomer per kub. I face centered cubic (fcc) ligger en atom på varje kubsida. Totalt innehåller en fcc-kub 4 atomer.



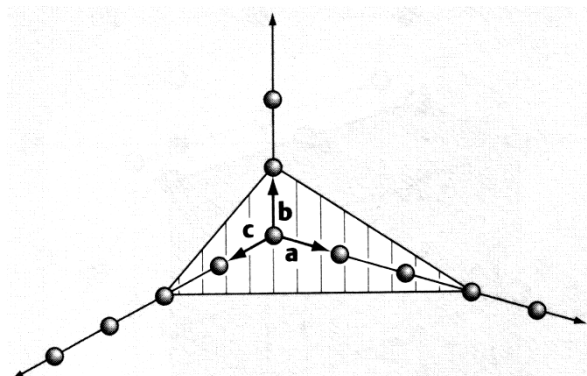
Alla dessa kubiska gitter kan beskrivas av vektorerna **a**, **b** och **c** enligt figuren till höger. Alla translationer av enhetscellen med vektorn $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$, där *u*, *v* och *w* är heltal leder fram till en ekvivalent gitterpunkt. På så vis byggs hela gittret upp.



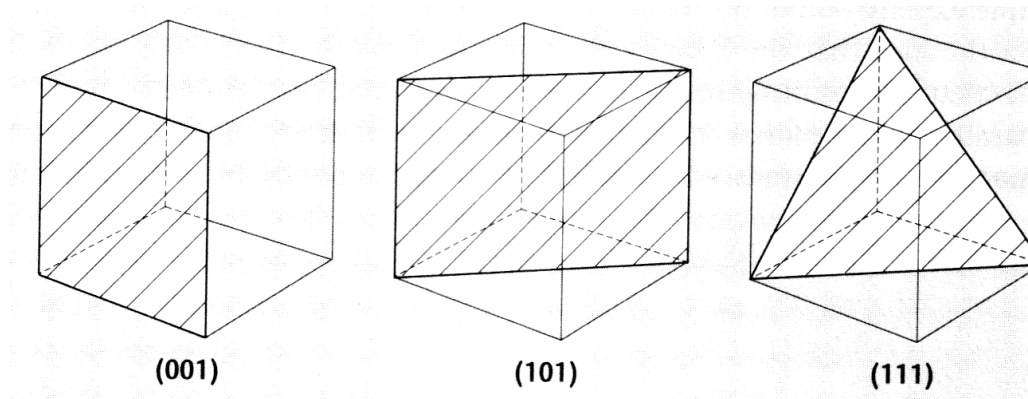
I de fall enhetscellen innehåller fler atomer än en beskrivs atomens *j*'s läge av vektorn $\vec{R}_j = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} + \vec{r}_j$, där vektorerna $\vec{r}_j$ beskriver gittrets bas, vilken ofta förkortat skrivs (*u_j*, *v_j*, *w_j*), där *u_j*, *v_j* och *w_j* är tal mellan 0 och 1. T.ex. diamantstrukturen beskrivs av ett fcc-gitter med två atomer i basen, i (0,0,0) och (1/4, 1/4, 1/4).

En kristall kan ses som uppbyggd av identiska kristallplan som indexeras med så kallade Millerindex. För en gitterstruktur med basvektorer **a**, **b** och **c** enligt figuren fås Millerindex för ett kristallplan (hkl):

- 1) Bestäm planets skärningspunkter med vektoraxlarna
- 2) Ta inversen av dessa tal
- 3) Sök minsta heltal med samma kvot



Några exempel på kristallplan ges i figuren nedan:



En riktning $[hkl]$ är normalen till planet (hkl) för kubiska strukturer.

Avståndet d_{hkl} mellan två plan (hkl) ges av uttrycket: $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ där a är kubens sida.

Vid röntgendiffraktion kan man betrakta interferens mellan strålar från närliggande plan i samma planskara. **Braggs lag** skrivs då: $2d \sin\theta = \lambda$. Vilket kan skrivas om med hjälp av uttrycket för avstånden mellan planen:

$$\sin\theta = \frac{\lambda \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a}.$$

I en alternativt framställning beskrivs den infallande röntgenstrålen av dess vågvektor $\mathbf{k}$, den spridda vågen beskrivs av vågvektorn $\mathbf{k}'$. Ändringen i vågvektor vid diffraktion mot planen (hkl) $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. För konstruktiv interferens kan man visa att $\mathbf{K} = \mathbf{G}_{hkl}$, där $\mathbf{G}_{hkl}$ är en så kallad reciprok gittervektor, se kapitel 11 i Hook&Hall. Detta är von Laues form av diffraktionsvillkor.

$\bar{G}_{hkl} = h\bar{a}^* + k\bar{b}^* + l\bar{c}^*$ där $\bar{a}^*, \bar{b}^*$ och $\bar{c}^*$ är reciproka vektorer som ges av:

$$\bar{a}^* = \frac{2\pi(\bar{b} \times \bar{c})}{\bar{a} \cdot (\bar{b} \times \bar{c})}, \quad \bar{b}^* = \frac{2\pi(\bar{c} \times \bar{a})}{\bar{b} \cdot (\bar{c} \times \bar{a})}, \quad \bar{c}^* = \frac{2\pi(\bar{a} \times \bar{b})}{\bar{c} \cdot (\bar{a} \times \bar{b})}$$

Det gäller då att:

$$\bar{a} \cdot \bar{b}^* = \bar{a} \cdot \bar{c}^* = 0, \text{ cykl. och } \bar{a} \cdot \bar{a}^* = \bar{b} \cdot \bar{b}^* = \bar{c} \cdot \bar{c}^* = 2\pi,$$

Diffraktionsvillkoret ger ingen information om den diffrakterade strålens intensitet I_{hkl} . I_{hkl} beror naturligtvis på den infallande strålens intensitet I_0 . Vidare är intensiteten proportionell mot antalet spridande atomer i kristallen $N_a N_b N_c$, där N_a är antalet atomer längs någon riktning $\mathbf{a}$. Slutligen beror den på kristallstrukturens bas, dvs hur atomerna är arrangerade i enhetsskuben. Intensiteten från enhetsskuben ges av dess strukturfaktor S_{hkl} .

Betrakta interferensen mellan en reflekterad våg från en atom i origo och en från atom j i punkten r_j . Fasset skillnaden mellan de två vågorna är $\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{K}$. Summerar man över alla atomer i basen fås uttrycket:

$$S_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i \cdot \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{K}} = \sum_j f_j e^{-2\pi i (u_j h + v_j k + w_j l)}$$

f_j är ett mått på atomernas spridningsförmåga, kallad den atomära formfaktorn. För små spridningsvinklar är den proportionell mot atomnumret. Index j inkluderar alla atomer i enhetskuben.

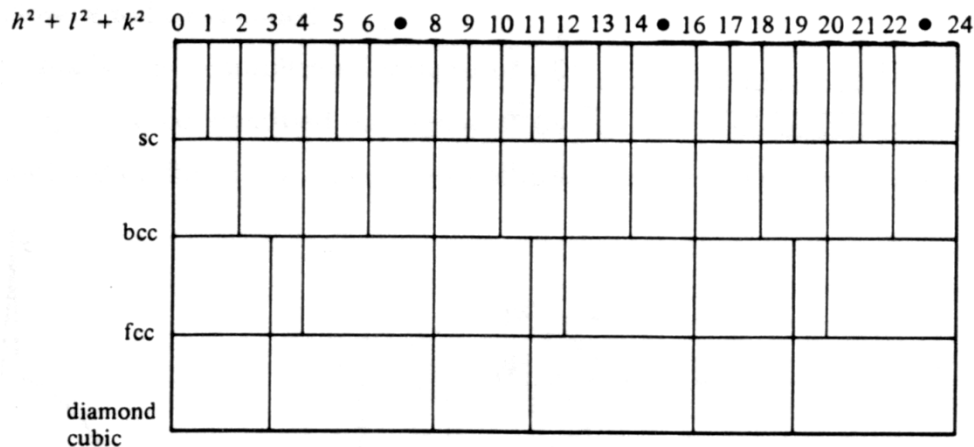
Exempel:

sc har basen (0,0,0,) vilket ger $S_{hkl} = f$ för alla (hkl)

bcc har basen (0,0,0) och (1/2, 1/2, 1/2), vilket ger
 $S_{hkl} = 2f$ när (h+k+l) är jämn och 0 när (h+k+l) är udda

fcc har basen (0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2) och (0,1/2,1/2)
 $S_{hkl} = 0$ utom när h,k,l alla är udda eller alla är jämna.

Tillåtna reflexer för sc, bcc, fcc och diamant sammanfattas i figuren nedan.



Olika kristallplan har olika atomär struktur. Den enkla kubiska strukturen har en atom i varje kubhörn, (100) planet har en kvadratisk struktur, (110) planet är rektangulärt och (111) planet har en hexagonal struktur. I bcc-strukturen ligger en atom i mitten av enhetskuben, den kommer att ligga mitt i (110)-planet. I fcc-strukturen ligger en atom i varje kubsida, som kommer att finnas med i både (110) och (111) planen. Dvs beroende på kristallstruktur och Millerindex kommer ett kristallplan att ha olika atomstruktur.

Sammanfattning av Föreläsning 10 & 11 Frielektronmodellen

I frielektronmodellen beskrivs elektroner som en ideal gas som endast växelverkar med varandra och gittret genom elastiska stötar. För en fri elektron är potentialen noll och Schrödingerekvationen kan skrivas $\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi(r) = \epsilon \Psi(r)$. Randvillkoren bestäms av den volym $V=L^3$ inom vilken elektronerna får röra sej fritt, typiskt en metallkub med sidan L .

Lösningarna är plana vågor, på formen $\Psi(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$.

Elektronens energi ges av $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. ($k=k_x+k_y+k_z$)

Antalet elektrontillstånd i ett intervall $d\epsilon$ runt energin ϵ , kallas **tillståndstätheten**, och är $g(\epsilon) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} (2m^3 \epsilon)^{1/2}$. (Uttrycket gäller bara i 3 dimensioner!).

Den högsta ockuperade energinivån vid $T=0$ är Fermienergin, ϵ_F . $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$

där k_F är Fermivåvektorn. $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ och n är elektrontätheten, N/V .

Sannolikheten att en energinivå med energin ϵ vid temperaturen T är upptagen av en elektron ges av **Fermi-Diracs fördelningsfunktion** $f(\epsilon, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{(\epsilon - \mu)}{k_B T}\right) + 1}$. μ motsvarar Fermienergin vid $T=0$. För metaller skiljer sej μ inte nämnvärt från ϵ_F vid normala temperaturer

Vid $T>0$ lyfts elektroner av den termiska energin över Fermienergin. Den totala energiökningen är temperaturberoende och ger upphov till elektrongasens värmekapacitet $C_V = \frac{\pi^2 k_B^2 g(\epsilon_F)}{3} T$. Genom att sätta in uttrycket för $g(\epsilon_F)$, eller Fermitemperaturen T_F , kan man få lite olika form på uttrycket (se detaljer i boken). Vad man ser är att C_V beror på tillståndstätheten vid Fermienergin, vilket gör att uttrycket kan användas även för system med något mindre fria elektroner. Generellt kan man skriva $C_V = \gamma T$, där γ är en materialparameter som kan bestämmas experimentellt.

De snabbaste elektronernas slumpmässiga rörelse ges av Fermihastigheten v_F : $\frac{1}{2} m v_F^2 = \epsilon_F$.

Elektrongasens **värmeledningsförmåga** ges av $K = \frac{1}{3} C_V v_F^2 \tau = \frac{\pi^2 n k_B^2 T \tau}{3 m_e}$

För att leda elektrisk ström förskjuts den sfäriska elektronfördelningen i k-rummet av ett yttre elektriskt fält. Rörelseekvationen $m \frac{dv}{dt} + \frac{mv}{\tau} = -eE$ beskriver elektronernas rörelse. E är det pålagda fältet, v är elektronernas drifthastighet, m är deras massa, τ är **relaxationstiden**, tiden mellan två på varandra följande kollisioner. **Drifthastigheten**, dvs den av fältet orsakade hastigheten antas bli noll efter varje kollision.

Lösningen till rörelseekvationen vid konstant ström ger **elektrongasens konduktivitet**: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$.

Resistiviteten är som bekant $\rho = 1/\sigma$. Det finns olika bidrag till resistiviteten, kollisioner mot gittret, mot defekter och korngränser i materialet. Enligt **Matthiesens lag** gäller att olika resistivitetsbidrag adderas enligt $\rho = \rho_1 + \rho_2 + \dots$

Wiedemann-Franz fann ett samband mellan den termiska och den elektriska ledningsförmågan i en

metall: $\frac{K}{\sigma T} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} = L$. L är Lorenztalet $2.45 \cdot 10^{-8} \text{ W}\Omega/\text{K}^2$

Sammanfattning av Föreläsning 12 och 13 Gittervibrationer och termiska egenskaper

Atomer i fasta material sitter inte still, de vibrerar. Man kan beskriva gittervibrationer genom att låta atomer vara kulor sammanbundna med fjädrar, vilka kommer i egensvängning. Rörelsen är kvantiserad och kallas fononer, ett gittervibrationskvantum. Dessa kan beskrivas som ett vågpaket och rör sej med gruppshastigheten.

Från en linjär kedja med atomer (massa M) på avstånd a sammanbundna av "fjädrar" med fjäderkonstanten K kan man visa ett samband mellan vinkelfrekvens, ω , och vågvektor, k , den så kallade **dispersionsrelationen**: $\omega^2 M = 4K \sin^2\left(\frac{1}{2}ka\right)$.

Sambandet är periodiskt i k , med perioden $2\pi/a$. Intervallet $-\pi/a < k \leq \pi/a$ definierar de vågtal som är fysikaliskt relevanta och kallas den **första Brillouinzonen**.

Grupphastigheten för ett vågpaket är $v_g = \frac{d\omega}{dk}$.

Ljudhastigheten fås ur dispersionsrelationen vid korta vågvektorer (dvs långa våglängder), $v_s = a(K/M)^{1/2}$.

Den maximala frekvensen är $\omega_{\max} = 2\sqrt{K/M}$.

För en **diatomär kedja**, massor M och m ($M > m$), fås flera lösningar. Återigen är lösningarna periodiska med perioden $2\pi/a$. Man får en s.k. "akustisk" gren, som i fallet med den enatomära kedjan, och en "optisk" gren med högre frekvenser:

$$\omega^2 = \frac{K(M+m)}{Mm} \pm K \left[\left(\frac{M+m}{Mm} \right)^2 - \frac{4}{Mm} \sin^2 \left(\frac{1}{2} ka \right) \right]^{1/2}.$$

Ljudhastigheten är i det här fallet $v_s = a \left(\frac{K}{2(M+m)} \right)^{1/2}$.

Den akustiska grenens maximala frekvens är $\omega_{\max} = \sqrt{2K/M}$.

Den optiska grenens minsta frekvens är $\omega_{\min} = \sqrt{2K/m}$ och den största $\omega_{\max} = \sqrt{2K(M+m)/Mm}$.

Värmekapaciteten för enatomiga gaser är $C_V = \frac{3}{2}R$, för tvåatomiga gaser $C_V = \frac{5}{2}R$. I ett fast material har varje atom sex frihetsgrader och enligt **Dulong - Petit** är då $C_V = 3R$, detta gäller oavsett material. Dulong - Petits värmekapacitet är temperaturoberoende, vilket inte stämmer med experiment. Dock stämmer resultatet väl vid höga temperaturer.

Vår strävsamme vän **Einstein** tänkte till och antog att atomer egensvänger som harmoniska oscillatorer med frekvensen ω . Energin ges av $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. Gittrets värmekapacitet blir då,

$$C_V = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{\left(e^{\theta_E/T} - 1 \right)^2} \text{ där } \theta_E = \frac{\hbar\omega}{k_B} \text{ är Einsteintemperaturen som är en materialparameter.}$$

Einsteins beskrivning stämmer inte riktigt vid låga temperaturer. **Debye** vidareutvecklade modellen genom att koppla samman atomerna som svänger med frekvenser $\omega = vk$, där v är ljudhastigheten i materialet och k är vågvektorn. Detta gäller upp till en max-frekvensen, $\omega_{\max}$. Gittrets värmekapacitet

blir då för $T < 0.1\theta_D$, $C_V = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 = \alpha T^3$ där $\theta_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B}$ är **Debyetemperaturen** som är en materialparameter. Debyes beskrivning stämmer väl med experimentella data.

Värmeledning: den termiska konduktiviteten från gittret $K = \frac{1}{3} C \ell v$, där ℓ är fononernas medelfria

väglängd och v är medelhastigheten som kan sättas till ljudhastigheten i materialet. Den vetgirige, som kunskapstörstande fördjupar sej i frågan, finner att både ℓ och v varierar med temperaturen på ett så komplicerat sätt att det faller utanför kursens ramar. Men lugn, det finns fortsättningskurser där porlande frisk fysik öses ur en aldrig sinande kunskapens källa att släcka den vetgiriges törst. I vissa fall har intresset släckts, men det sker endast i undantagsfall.

Sammanfattning av Föreläsning 14-17

”Elektroner i periodisk potential, halvledare, dopning och några halvledarkomponenter”

Liksom elastiska vibrationer i en periodisk struktur har periodiska lösningar ger en periodisk elektrisk potential periodiska elektronvågfunktioner och periodisk dispersionsrelation $\epsilon(k)$, så kallade band. Hur dessa lösningar ser ut exakt är ofta komplicerat, men periodiciteten följer det reciproka gittret.

Lösningen i ett enkelt endimensionellt fall kan skrivas $\epsilon(k) = E - 2A \cos ka$ där a är ”gitterparametern” och k är vågvektorn. E är energin för de orbitaler som bygger upp bandet, och bandbredden $4A$ bestäms av hur stark växelverkan mellan atomerna är, hur starkt överlappet mellan de bindande orbitalerna från de bindande atomerna är.

I ett verkligt material byggs flera band upp, dels av olika atomära orbitaler och på grund av att bandgap skapas vid varje Brillouinzonsgrens, och detta naturligtvis i tre dimensioner. När banden fylls med elektroner fylls de tillstånd med lägst energi först. Om ett band fylls helt och det fortfarande finns elektroner kvar att fördela fylls nästa band. Om det översta bandet är halvfullt har vi en metall, om det översta är helt fyllt och nästa band är tomt har vi en halvledare eller isolator. Vilket det är bestäms av bandgapets storlek.

Elektronens utbredningshastighet i ett band ges av $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk}$.

I ett pålagt elektriskt fält kommer elektronerna att accelereras, $\frac{dv_g}{dt} = \frac{-e}{m_e^*} \bar{E}$ precis som i frielektronfallet, men med skillnaden att de har en effektiv massa $m_e^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\epsilon}{dk^2}\right)}$, dvs de elektriska

egenskaperna bestäms av elektronbandens form. Nära botten av ett band är andraderivatan positiv och laddningsbärarna har positiv massa. Nära toppen av ett band är andraderivatan däremot negativ och laddningsbärarna har negativ massa. Dessa kan beskrivas som hål med positiv laddning.

I halvledare är valensband (VB) och ledningsband (LB) skilda av ett bandgap, ϵ_G . När en elektron lyfts från toppen av valensbandet över bandgapet till botten av ledningsbandet i en odopad halvledare skapas två laddningsbärare; en elektron i ledningsbandet och ett hål i valensbandet. Dessa skapas alltid i par (i det odopade fallet), så att antalet ledningsbandselektroner är lika med antalet valensbandshål, $n_i = p_i$. Elektronernas och hålets mobiliteter i respektive band är μ_e och μ_h . Den totala konduktiviteten är $\sigma_i = ne\mu_e + pe\mu_h$. De effektiva massorna kommer in i uttrycket för mobiliteten.

Laddningsbärarkoncentrationerna bestäms av tillståndstäthet och Fermifunktion.

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{(\mu - \epsilon_G)/k_B T} = N_C e^{(\mu - \epsilon_G)/k_B T} \quad p = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\mu/k_B T} = N_V e^{-\mu/k_B T}$$

μ är Ferminivån i halvledaren. Produkten np är oberoende av Ferminivåns position, den beror endast av bandgapet och temperaturen och måste då vid given temperatur vara konstant, dvs $np = n_i p_i$.

$$\text{Ferminivån bestäms av uttrycket } \mu = \frac{\epsilon_G}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)$$

Vid absorption av ljus lyfts en elektron från valensbandet till ledningsbandet. Fotonens rörelsemängd är så liten att elektronens rörelsemängd är densamma före och efter övergången. Ett direkt bandgap innebär att valensbandsmaximum och ledningsbandsminimum ligger vid samma $\mathbf{k}$ -värde. Material med direkt bandgap kan absorbera fotoner över bandgapet.

Indirekt bandgap innebär att valensbandsmaximum och ledningsbandsminimum ligger vid olika $\mathbf{k}$ -punkter i det reciproka rummet. Optiska övergångar över bandgapet kan inte ske utan samtidig excitation av fononer för att bevara rörelsemängden i processen.

Med **Hallmätningar** mäts laddningsbärartyp (positiva eller negativa) och koncentration.

Vid **dopning** tillförs kontrollerade mängder "föroreningar" som antingen ger eller tar elektroner från värdmaterialet. På så vis skapas ett överskott av negativa eller positiva rörliga laddningsbärare och materialet blir n-typ eller p-typ. Ofta väljer man att dopa materialet så att dess elektriska egenskaper är temperaturoberoende (eller åtminstone rimligt beroende), så att den apparatvari halvledaren sitter jobbar som den ska både på vinter och sommar. Om man vill mäta temperatur med hjälp av temperaturoberoende variationer i elektrisk resistivitet ska man naturligtvis dopa för att maximera just den effekten.

För att n-dopa tillförs N_D donatoratomer. I Si använder man grupp V atomer som har 5 valenselektroner varav fyra används att binda med och den femte sitter löst och exciteras termiskt upp i ledningsbandet vid relativt låga temperaturer. Vid n-dopning skiftas Fermi-nivån mot ledningsbandet enligt:

$$\mu = \varepsilon_G - k_B T \ln \left(\frac{N_C}{N_D - N_A} \right)$$

Här har man satt in $N_D - N_A$ istället för N_D , ifall man har dubbeldopat materialet. Uttrycket gäller bara i det extrinsiska temperaturområdet. Vid högre temperaturer kommer elektroner att lyftas över bandgapet i mätbara mängder. När n är lika stort som N_D kommer Fermi-nivån att sjunka ned under donatornivån.

Samma resonemang, fast tvärtom, gäller för p-dopning. Man tillsätter N_A acceptorer, som i Si ska ha 3 valenselektroner. Det lämnar en obunden bindning som kan vandra runt i materialet som ett

ledande hål. Fermi-nivån ges av uttrycket: $\mu = k_B T \ln \left(\frac{N_V}{N_A - N_D} \right)$

Om man tar ett p-dopat material och slår samman det med en n-dopad bit av samma material skapas en pn-övergång. Fermi-nivåerna i p- resp n-områdena ligger på olika energi. När de förs samman kommer Fermi-nivåerna att hamna på samma energi. Det sker genom transport av rörliga laddningsbärare, elektroner från n till p och hål från p till n. Det mer eller mindre på rörliga laddningsbärare tomma området närmast gränsen kallas utarmningsområde. De kvarlämnade orörliga joniserade dopatomerna skapar en elektrostatisk potential och ett elektriskt fält mellan p och n regionerna. Detta inbyggda fält, motverkar fortsatt laddningstransport. Potentialskillnaden, $\Delta\phi_0$, mellan n och p bestäms av Fermi-nivåskillnaden, dvs dopningen, i de tvenne områdena. Den elektrostatiska potentialen $\phi(x)$ varierar över gränsområdet. Bredden på utarmningsområdet bestäms av dopning.

Om en spänning läggs över pn-övergången kommer den, inte helt förvånande, att leda ström. Men inte hur som helst och inte lika mycket i båda riktningarna, vi har fått oss en likriktande komponent, en diod. Den kan användas till exempel som en solcell, där ljus omvandlas till elektroner eller tvärtom som en LED (light emitting device) som av en elektrisk puls gör ljus. Mer avancerade komponenter bygger på t.ex. pnp, npn kombinationer.