

Kursen i FTF innehåller 3st områden

Kristallstruktur, elektronstruktur+excitationer, egenskaper
(optiska, magnetiska...)

Uppgifter:

1. Isolatorer
2. Fononer
3. Metaller
4. Halvledare
5. Magnetism

Varje uppgift innehåller dessa moment

Uppgift 1: ISOLATORER

GRUNDUPPGIFT

Bestäm vilket grundämne prov A består av med röntgendiffraktion (Debye-Scherrer).
Röntgenröret har en Cu-anod och med en Ni-folie filtreras allt utom de båda Ka-linjerna bort.

Mät upp och tolka den optiska transmissionen för Si i området 6.7 eV till 400 cm⁻¹.

EXTRAUPPGIFT

Studera olika egenskaper hos isolatorer.

Förslag:

Studera optiska egenskaper hos olika isolatorer, tillgängliga är LiF, NaCl, KBr och kvarts.
Skapa (lämpligen genom röntgenbestrålning) och studera färgcentra.

Uppgift 2: FONONER

GRUNDUPPGIFT

Bestäm vilket grundämne prov B består av med röntgendiffraktion (Debye-Scherrer). Röntgenröret har en Cu-anod och med en Ni-folie filtreras allt utom de båda Ka-linjerna bort.

Mät upp och tolka den optiska transmissionen för Ge i området 6.7 eV till 400 cm⁻¹.

EXTRAUPPGIFT

Studera olika egenskaper hos fononer.

Förslag:

Studera fononernas inverkan på de optiska egenskaperna hos olika fasta ämnen, exempelvis Ge, LiF, NaCl, KBr och kvarts.

Studera en endimensionell mekanisk modell av ett gitter bestående av ryttare på en luftskena sammanbundna med fjädrar.

Uppgift 3: METALLER

GRUNDUPPGIFT

Bestäm vilket grundämne prov C består av med röntgendiffraktion (Debye-Scherrer).
Röntgenröret har en Cu-anod och med en Ni-folie filtreras allt utom de båda $K\alpha$ -linjerna bort.

Mät upp och tolka den optiska transmissionen för Si i området 6.7 eV till 400 cm^{-1} .

EXTRAUPPGIFT

Studera olika egenskaper hos metaller.

Förslag:

Studera optiska egenskaper hos olika metaller, tillgängliga är tunna filmer av Cu, Ag och Au.

Förånga en tunn Al-film och studera de optiska egenskaperna.

Mät energi gap i supraledande Pb.

Studera Mie plasmoner i metalliska nanopartiklar

Studera optiska egenskaper av en fulleren film

Uppgift 4: HALVLEDARE

GRUNDUPPGIFT

Bestäm vilket grundämne prov D består av med röntgendiffraktion (Debye-Scherrer). Röntgenröret har en Cu-anod och med en Ni-folie filtreras allt utom de båda Ka-linjerna bort.

Mät upp och tolka den optiska transmissionen för GaAs i området 6.7 eV till 400 cm^{-1} .

EXTRAUPPGIFT

Studera olika egenskaper hos halvledare.

Förslag:

Studera optiska egenskaper hos olika halvledare, tillgängliga är Ge, Si, GaAs och InSb.

Studera Halleffekten hos en dopad Ge-kristall.

Studera resistansens temperaturberoende hos InSb.

Uppgift 5: MAGNETISM

GRUNDUPPGIFT

Bestäm vilket grundämne prov E består av med röntgendiffraktion (Debye-Scherrer). Röntgenröret har en Cu-anod och med en Ni-folie filtreras allt utom de båda Ka-linjerna bort.

Mät upp och tolka den optiska transmissionen för InSb i området 6.7 eV till 400 cm^{-1} .

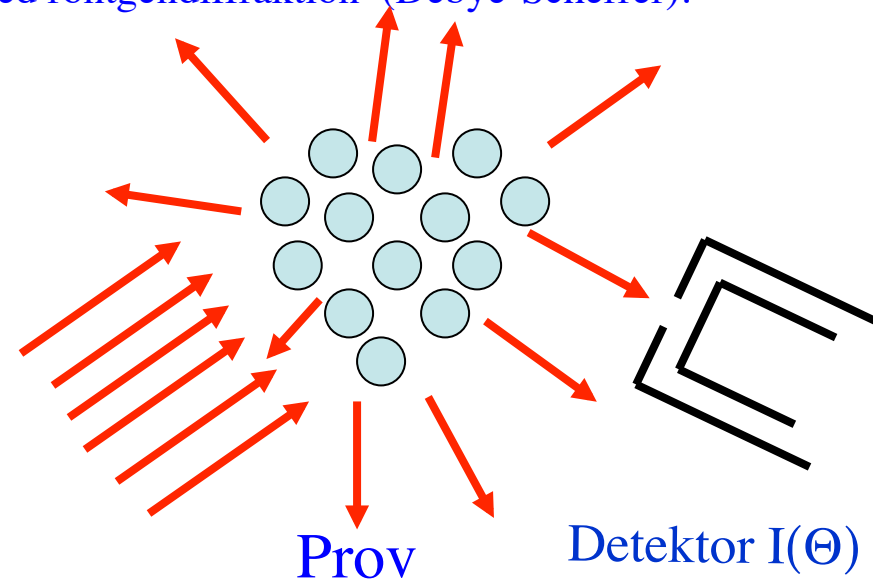
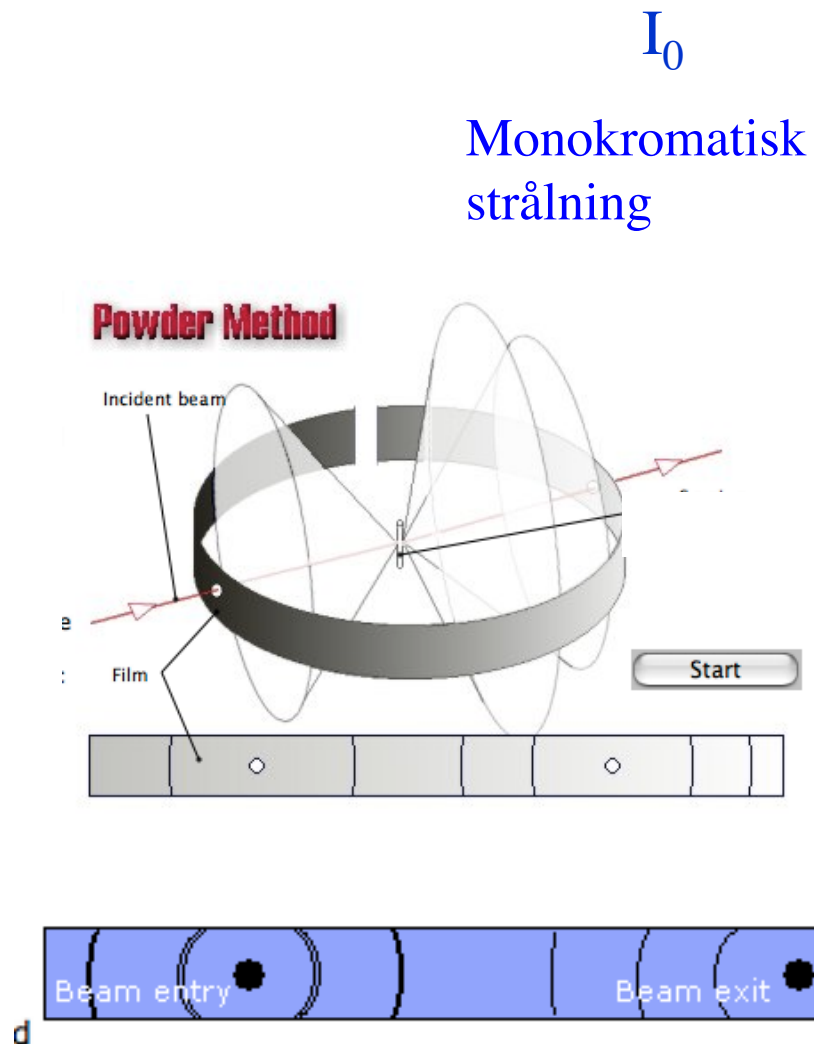
EXTRAUPPGIFT

Undersök magnetiska egenskaper (använd Gouys metod för magnetiska mätningar) hos 3 st valfria prover (det finns 5 st prover tillgängliga; I-V) och ge en så fullständig beskrivning av proverna som möjligt.

Tips: Prov III innehåller en liten mängd Fe. Uppskatta hur stor mängd Fe det finns i materialet. Prov V är en Cu förening innehållande bla. S och O.

Struktur bestämning

Bestäm vilket grundämne prov X består av med röntgendiffraktion (Debye-Scherrer).



$I(\Theta)$ bestäms av:

Individuella atomer (atomär formfaktor)

Kristallstruktur (strukturfaktor)

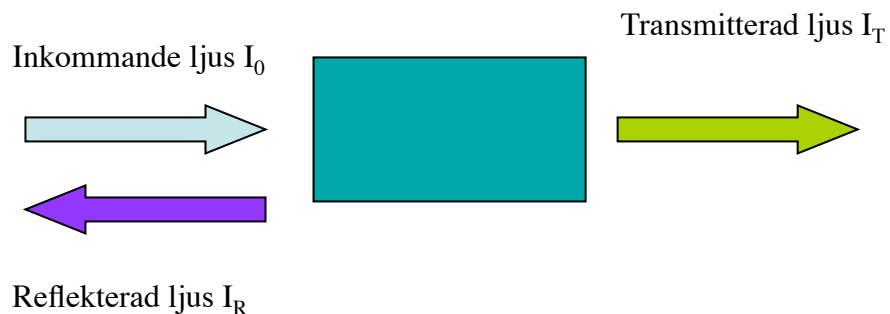
Bestäm:

GITTER?

GITTER PARAMETER?

ÄMNE?

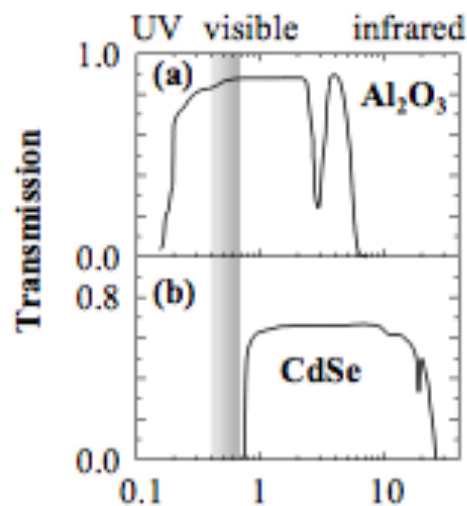
Mät upp och tolka den optiska transmissionen för Ge i området 6.7 eV till 400 cm⁻¹



$$T = I_T / I_0$$

$$R = I_R / I_0$$

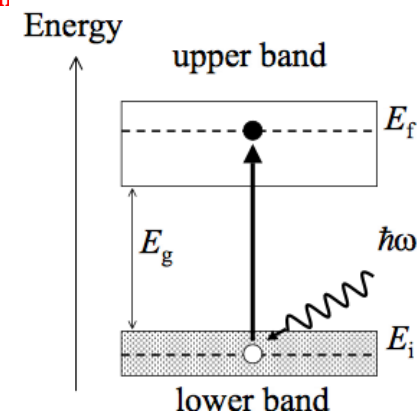
Varför studera T eller R som funktion av ω ????



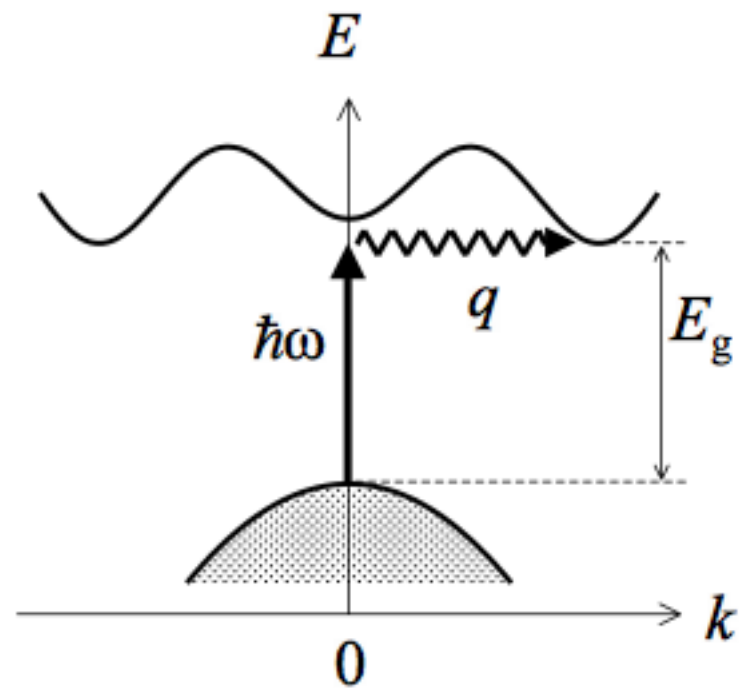
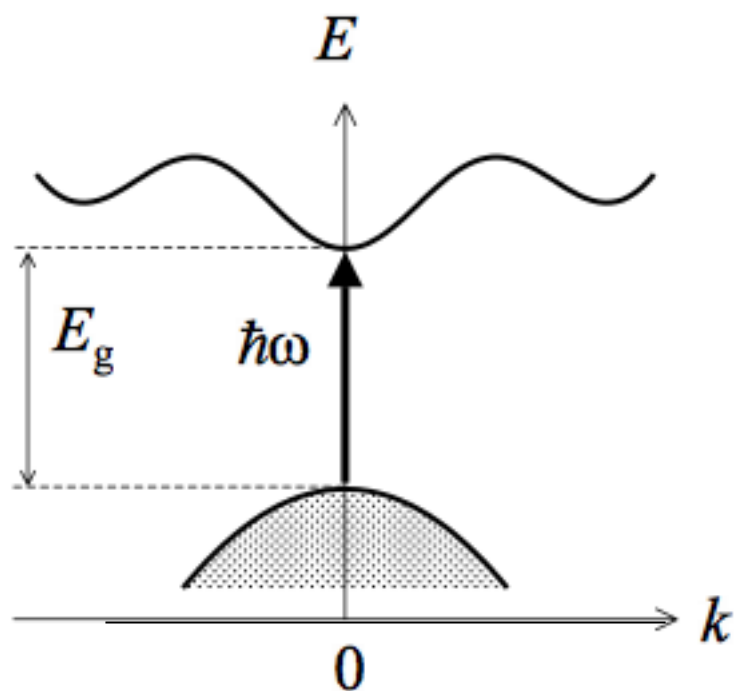
Transmissionspektrum **elektronstruktur**
samt **excitationer (elektron**

Vad betyder detta?

Elektron struktur

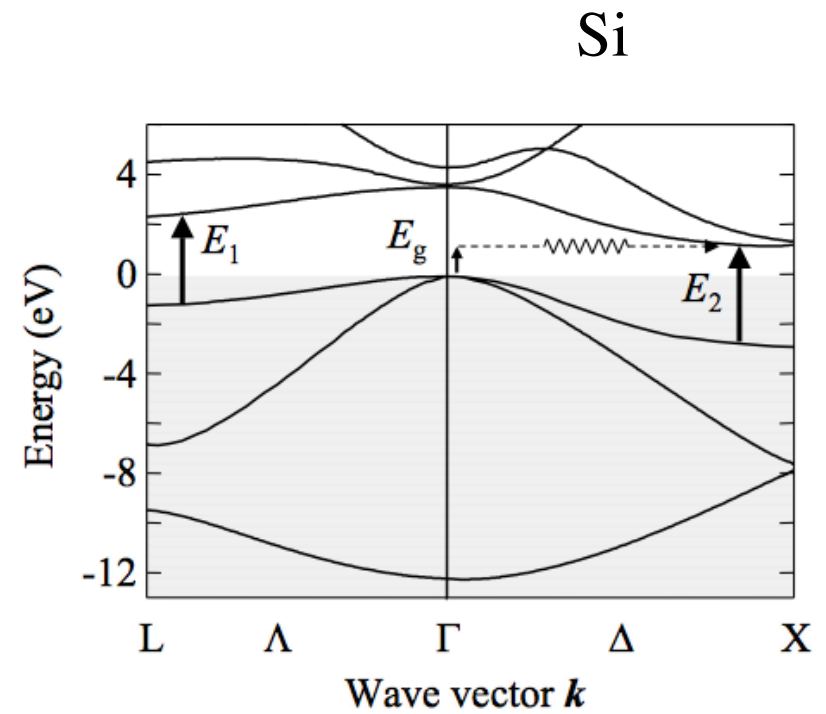
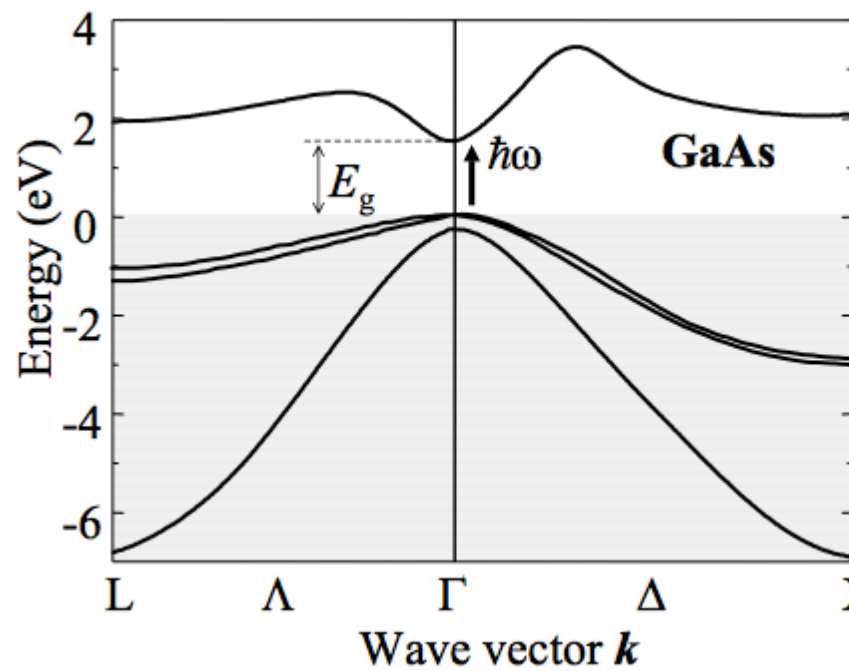


Direkt vs indirekt bandgap



$$k_{\text{foton}} = 2\pi/\lambda \text{ cka } 10^7 \text{ m}^{-1}$$

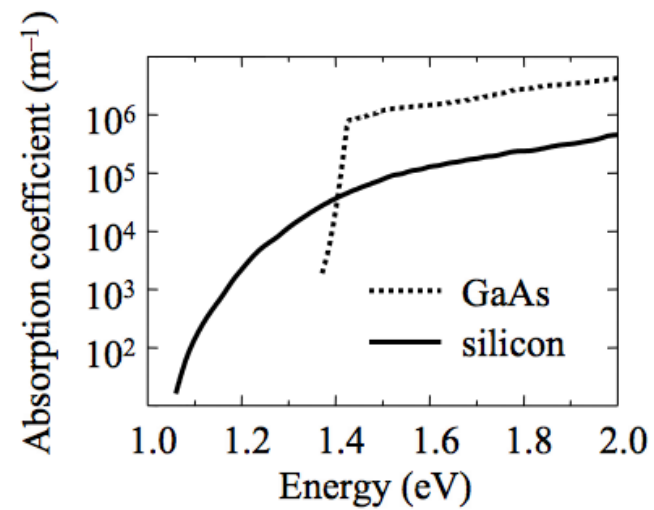
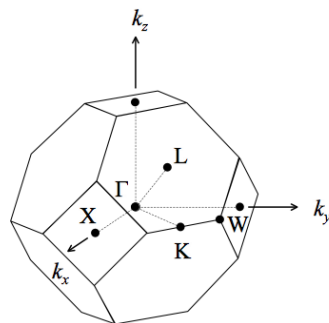
$$\pi/a \text{ cka } 10^{11} \text{ m}^{-1}$$



fcc lattice Brillouin zone

Symmetry points

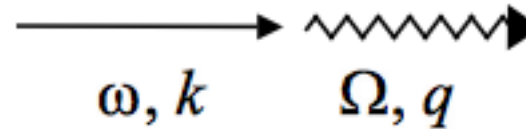
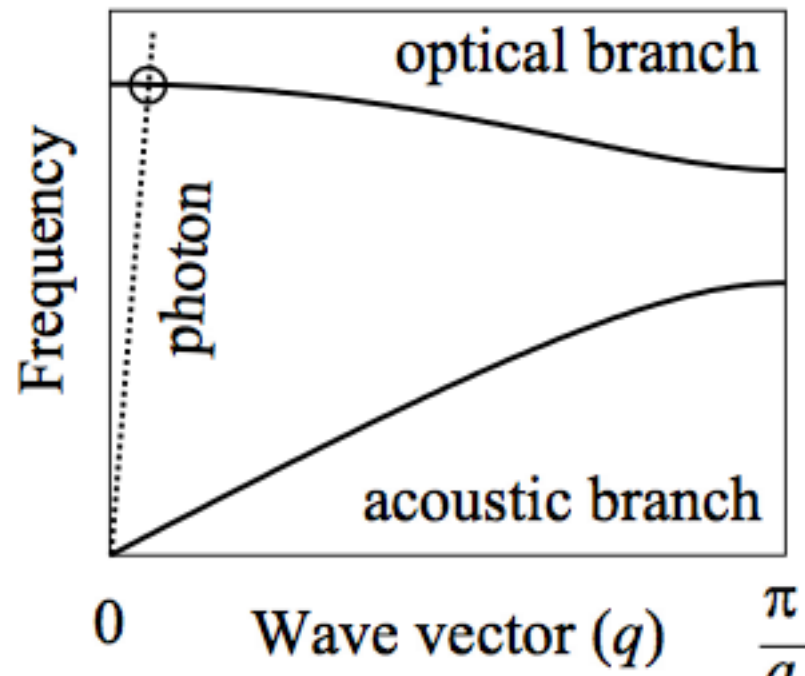
Γ 000
X 100
010
001
K 110
L 111



Excitationer?

Fononer (0-cka 50 meV)

Elektroniska (0-E_f i metaller, Eg och upp i HL)

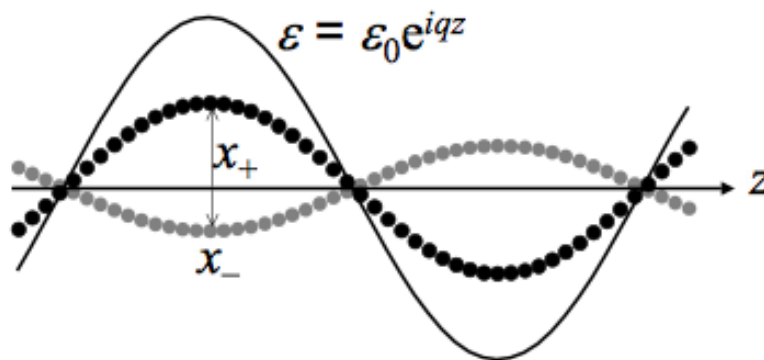


Resonant absorption när foton och fonon frekvens och vågvektor matchar

OK för TO optiska fononer

OK för ioniska och polära system

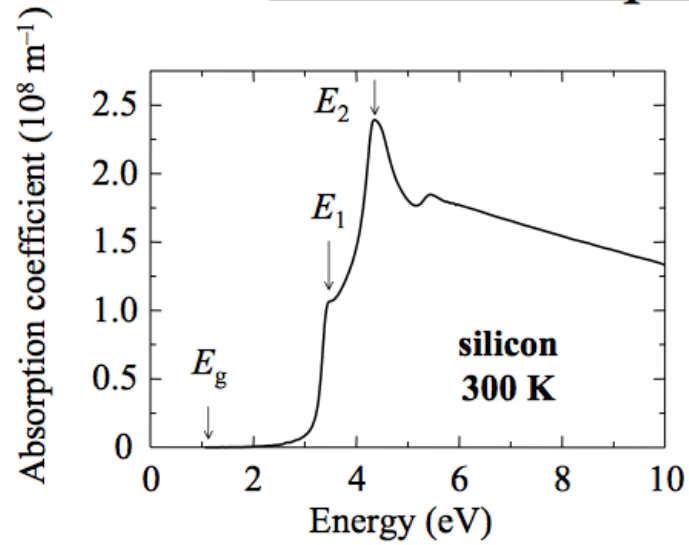
Absorption i IR området



Hur är det med Ge, Si, Ga As ??

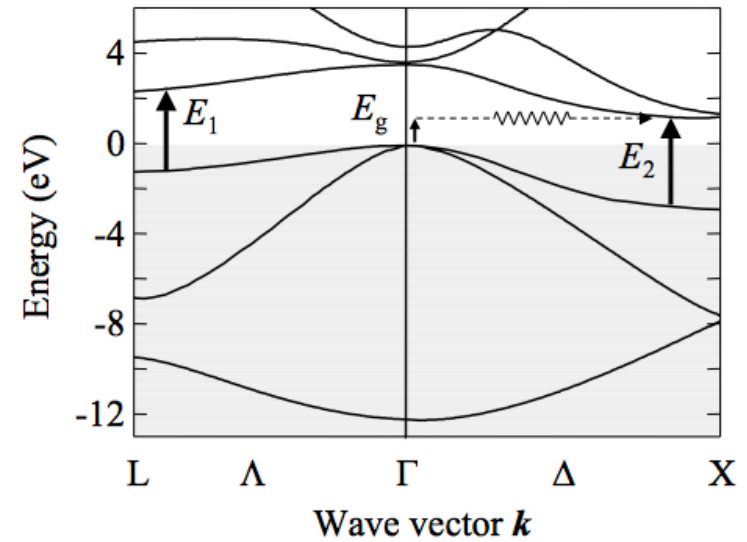
Kovalent bindning

Silicon absorption



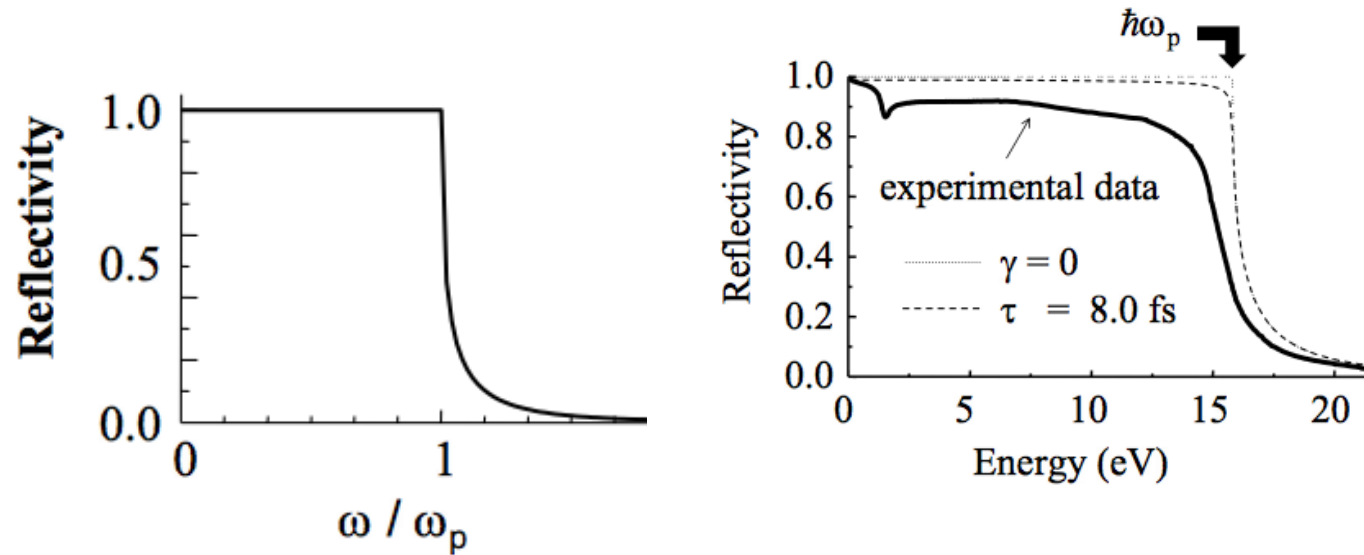
- Indirect band at 1.1 eV

- **Critical point** at E_1 (3.2 eV) and E_2 (4.3 eV)



Metaller

Fri elektron model



Aluminium

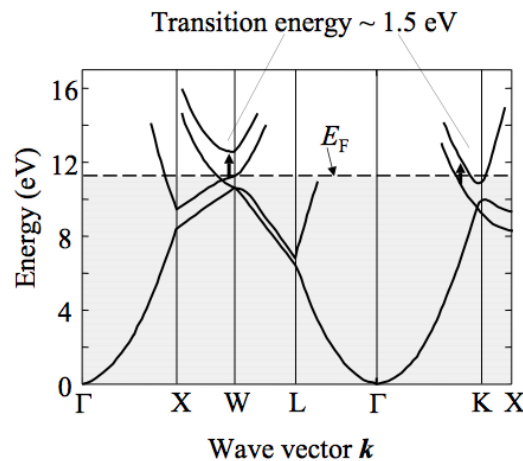
$$\hbar\omega_p = 15.8 \text{ eV},$$

$$\sigma = 3.6 \times 10^7 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$$

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}$$

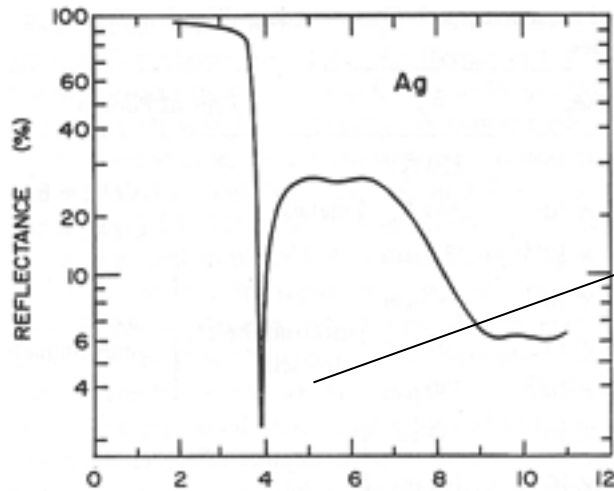
$$\omega_p = \left(\frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m_0} \right)^{1/2}$$

Interband transitions in Aluminium



- Transitions from filled states below E_F to empty states above E_F
- Very high density of states for parallel bands
- “parallel band effect” at the critical points
- Hence reflectivity dip at 1.5 eV

Ag



Vad händer här??? $\omega_p = 8.98$ eV

H. Ehrenreich and H. R. Philipp, Phys. Rev. 128, 1622 (1962)

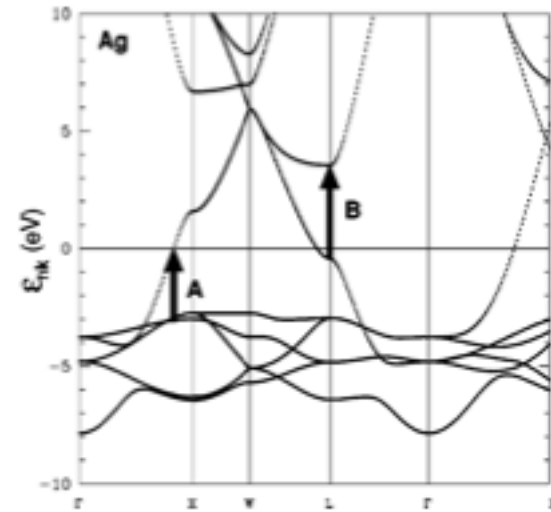
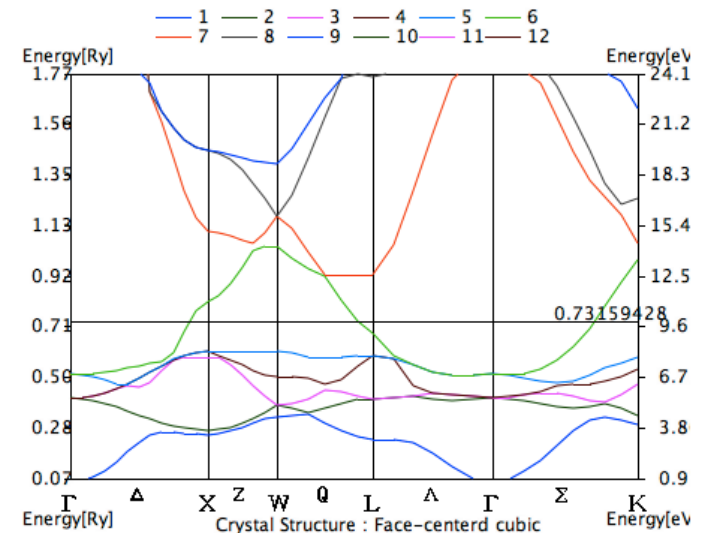
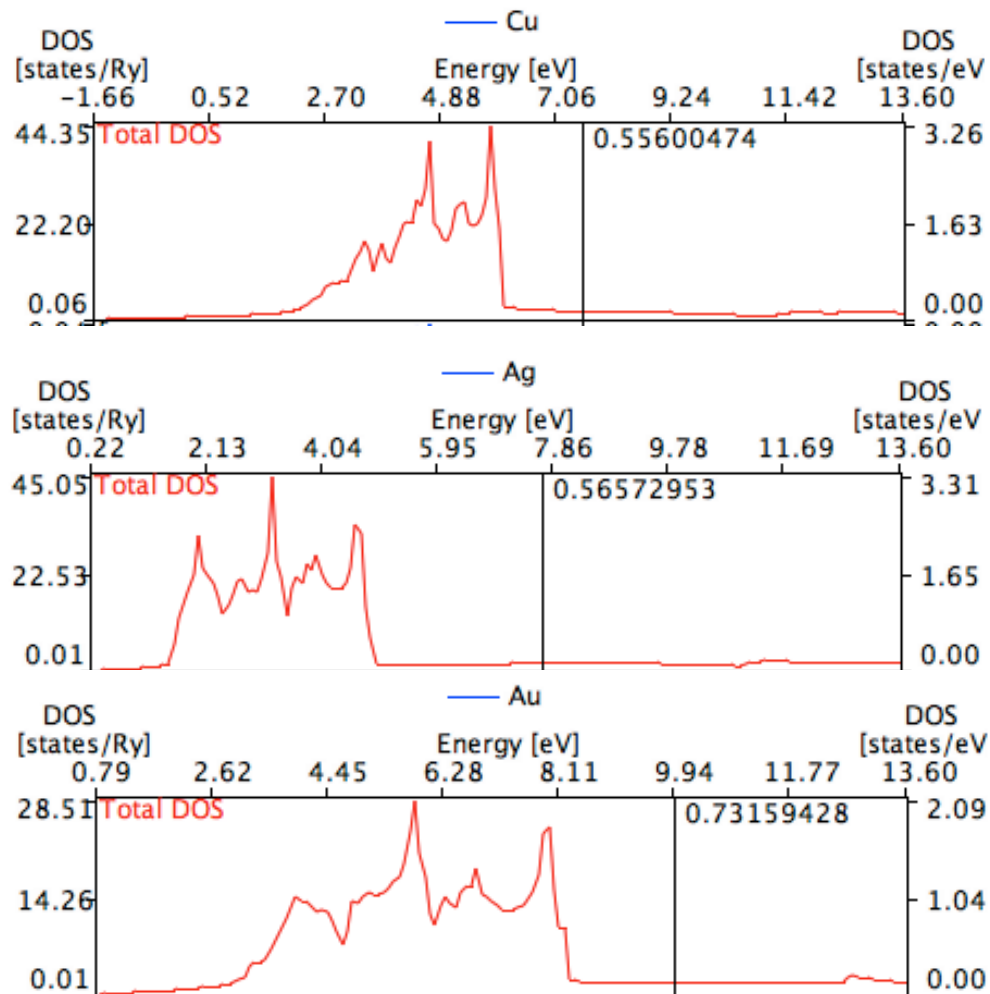


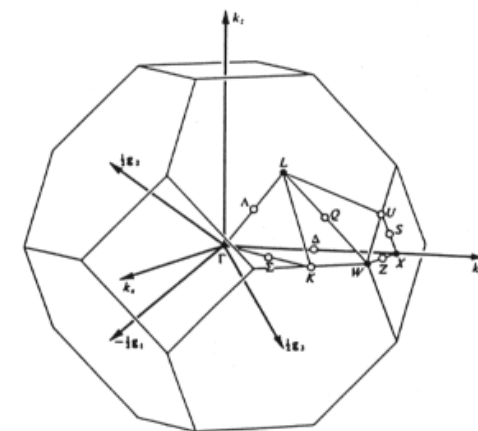
FIG. 1. Calculated LDA band structure of Ag. Arrows indicate two examples (A and B) of the types of interband transitions that couple to the plasmonic excitations in the long-wavelength limit, for energies above the interband excitation threshold. The crystal structure is fcc, with a lattice parameter $a = 4.09$ Å. The zero energy corresponds to the Fermi level.

M. A. Cazallila et al., Phys. Rev. B. 61. 8033, 2000

Övergångs metaller

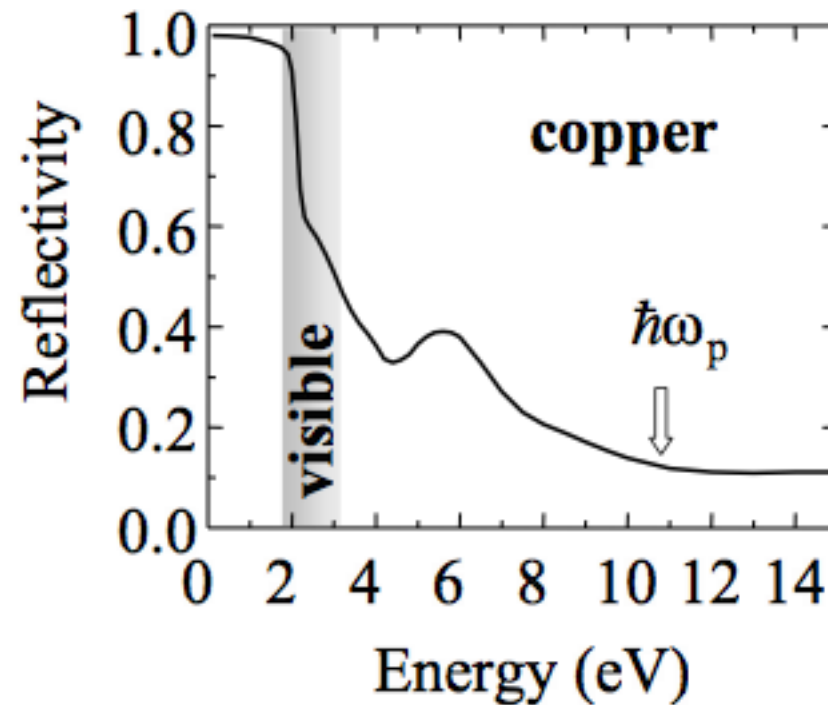
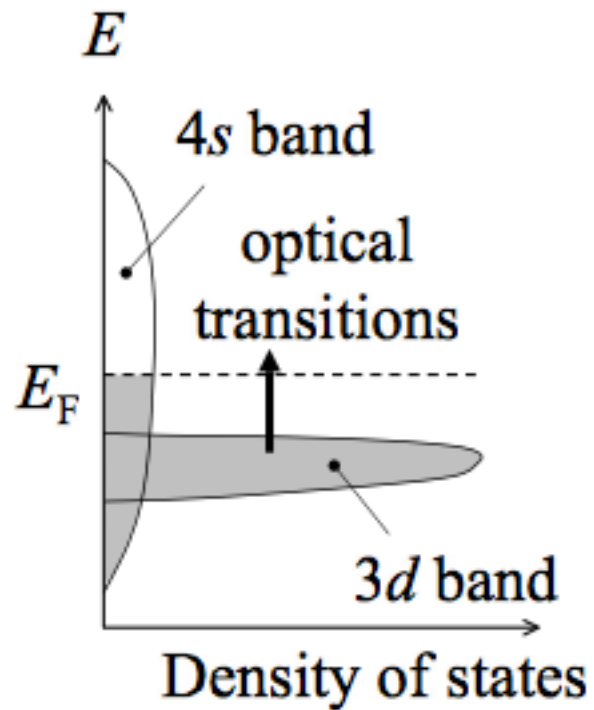


Face centered cubic lattice

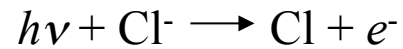


$$\Gamma = (000); X = (\frac{1}{2}0\frac{1}{2}); L = (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}); W = (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}).$$

Glöm fri elektron gas model!



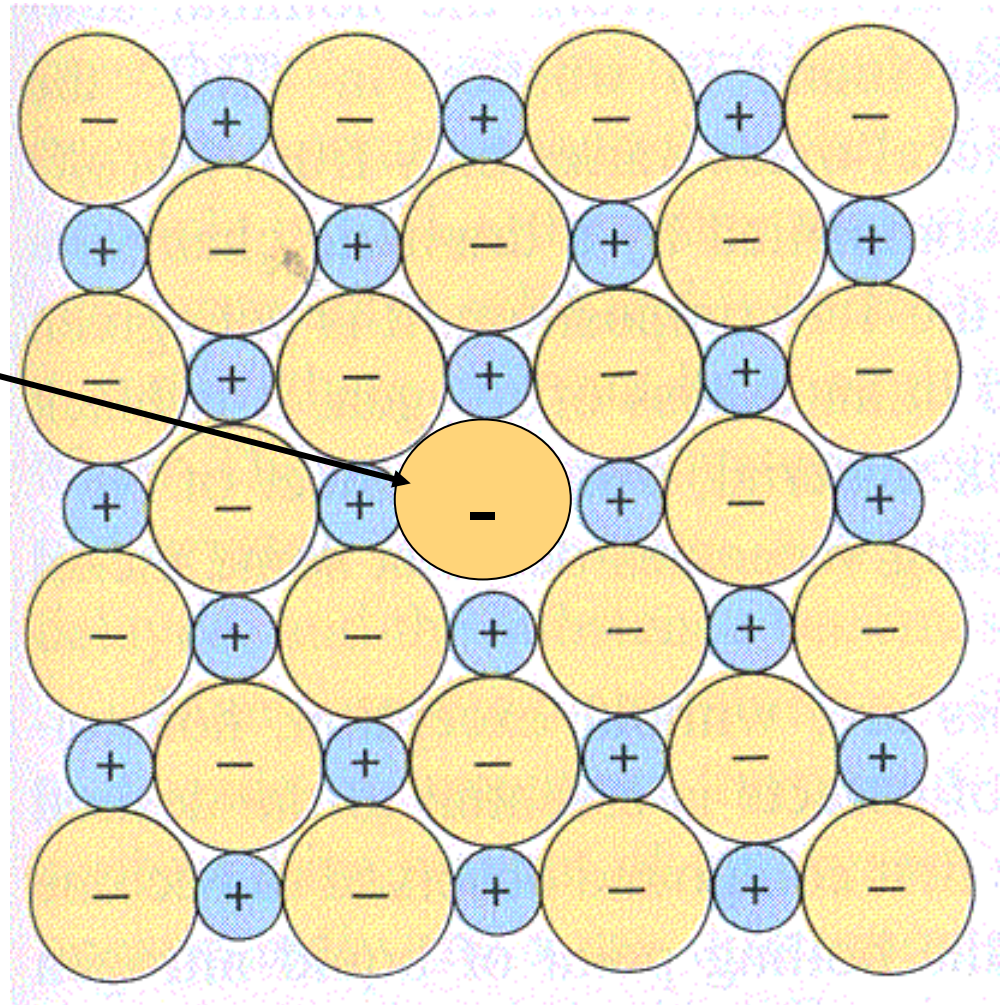
Color center defect



The uncharged Cl is not affected by the + charges and is considerably smaller than the Cl^- .

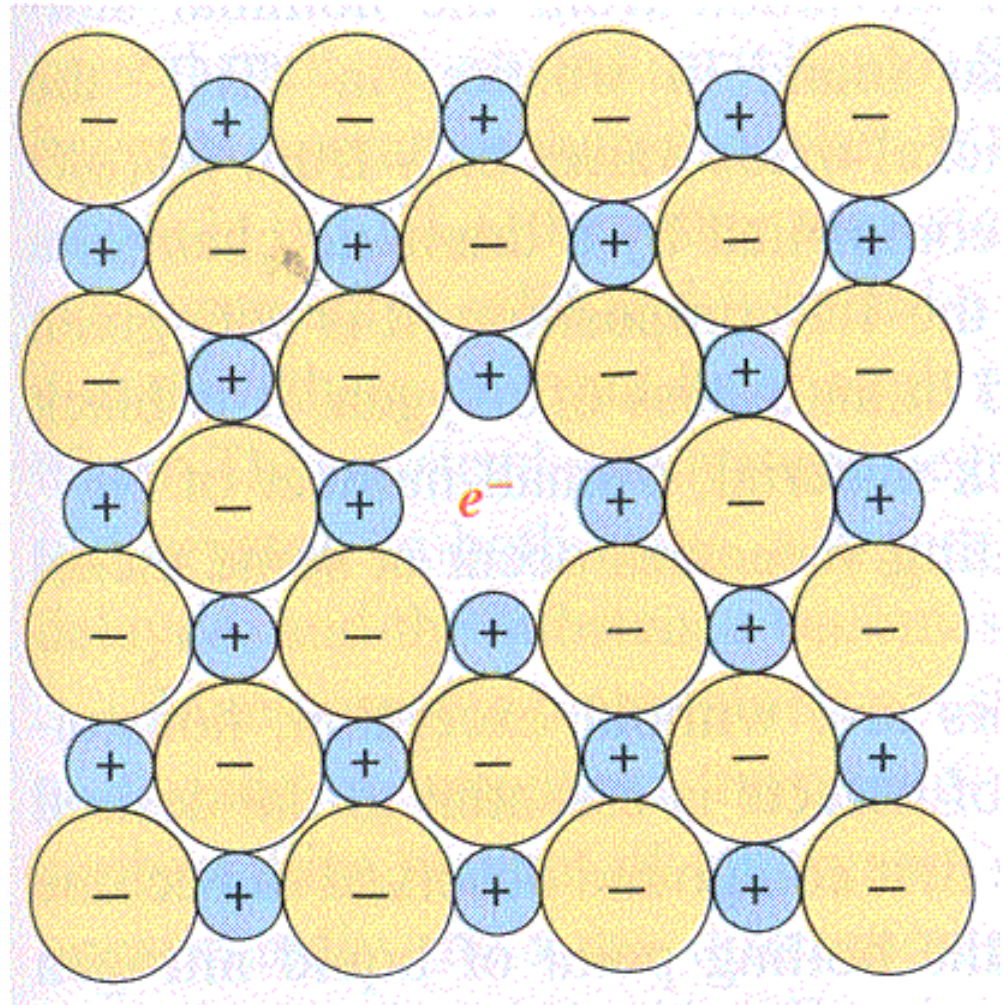
The Cl can move through and leave, the lattice.

The electron can be trapped in the octahedral vacancy left by

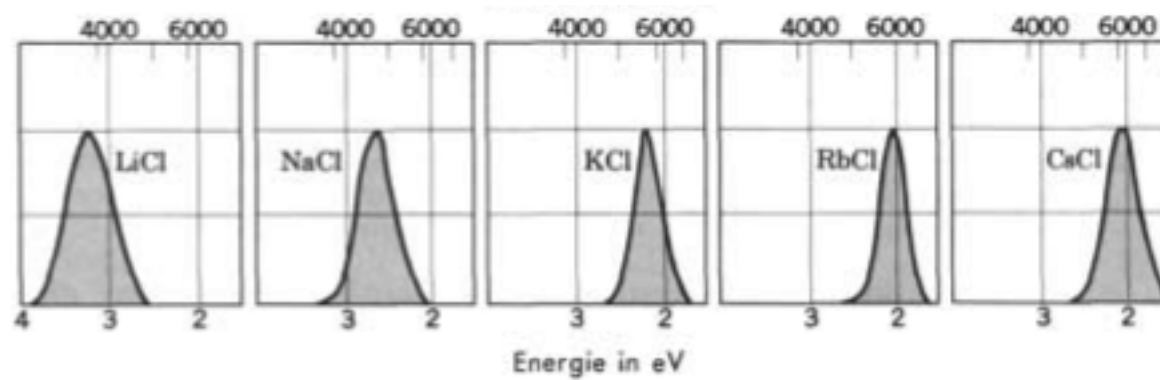
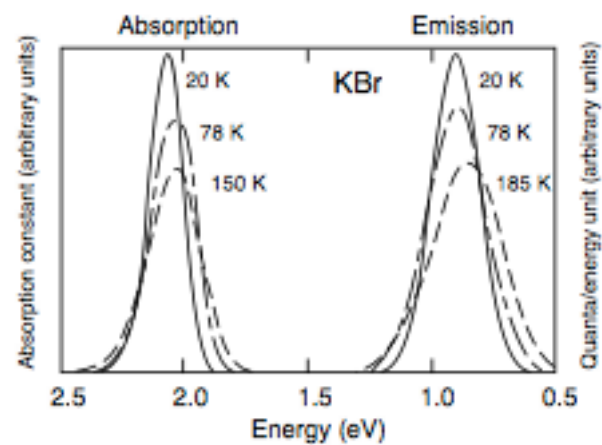
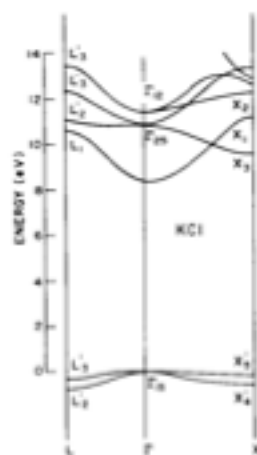


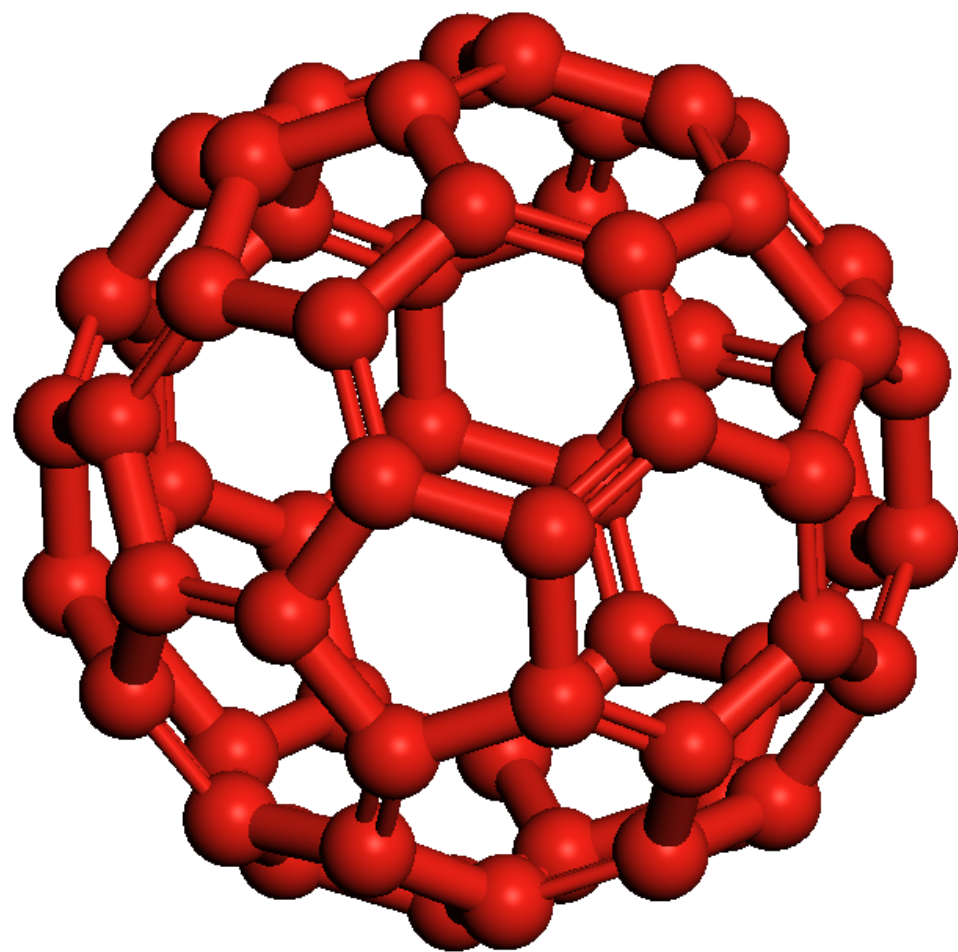
Cl	0.99 Å
Cl^-	1.81 Å

Color center defect

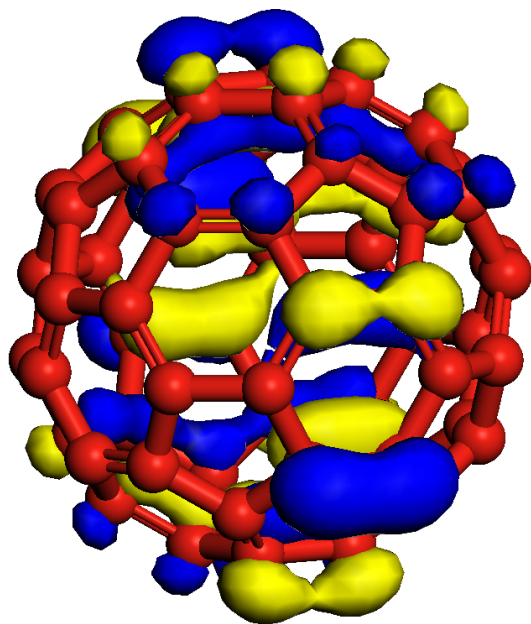


The presence of e^- in a void leads to an electronic transition in the visible range.

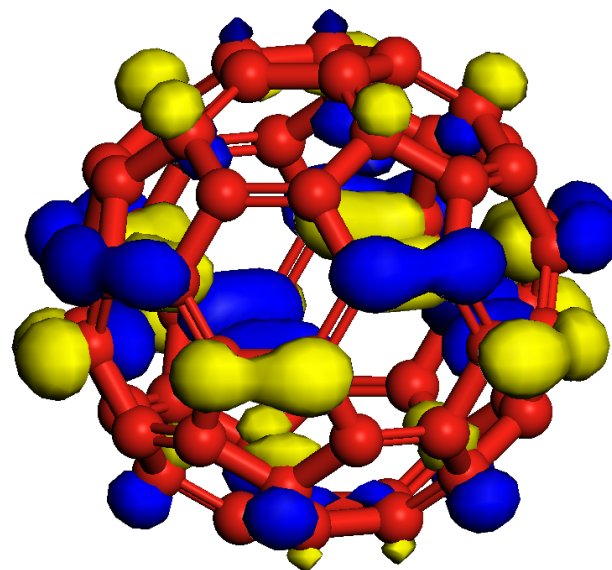




HOMO

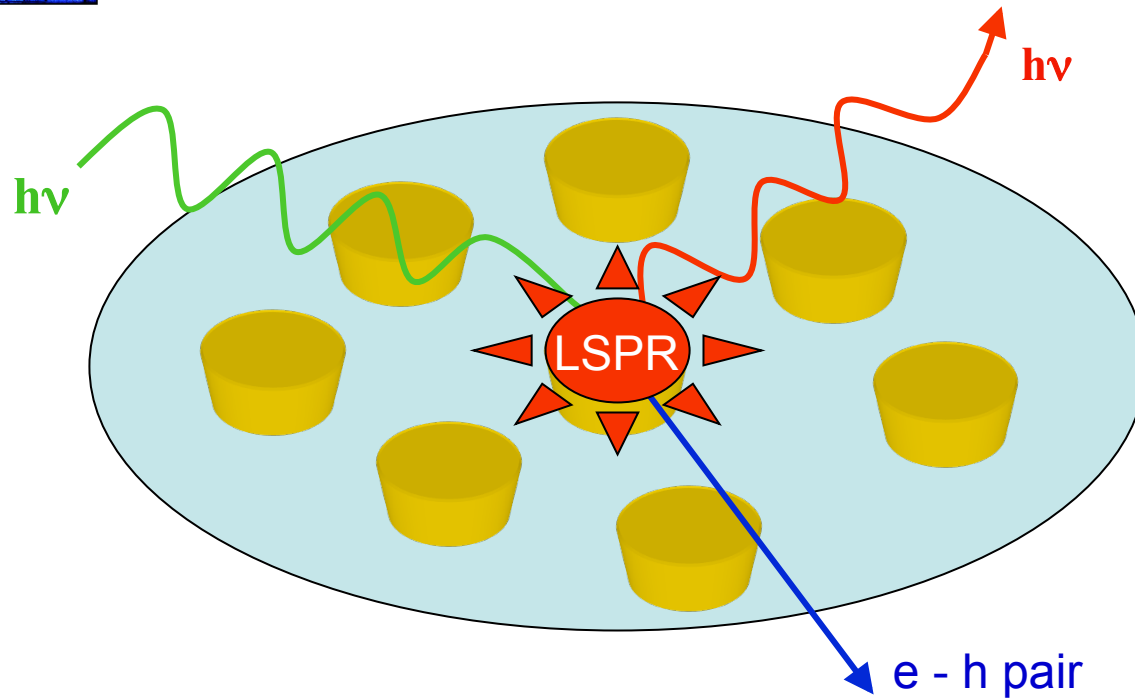


LUMO





Nanoparticle Optics – Plasmon Resonances



Resonant collective oscillation of conduction electrons in a particle.

Localized because $d < \lambda$ and thus excitable by light

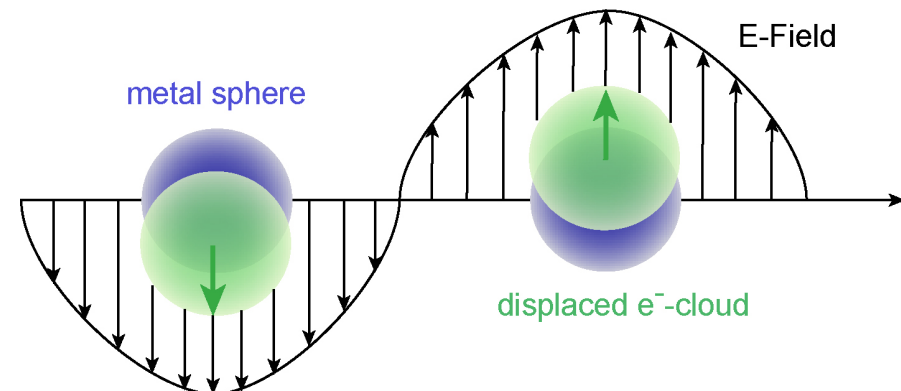
Two decay channels:

- re-emission of a photon
→ "scattering"
- formation of e - h pair
→ "absorption"

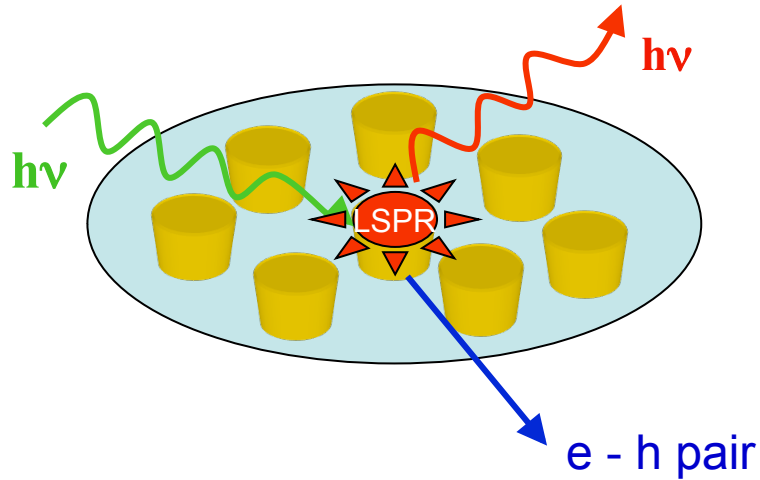
Decay time ca. 10 fs

LSPRs for Au, Ag and Cu known to be in the visible range of electromagnetic spectrum

Strongly enhanced electromagnetic field around the particle



Goal: Plasmon Mediated Chemistry



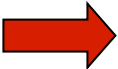
Plasmon resonance determined by:

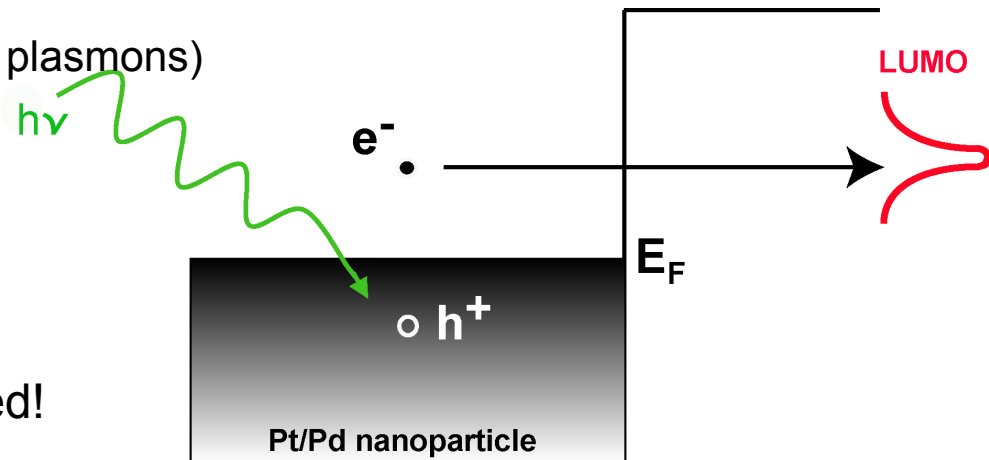
- Particle size
- Particle shape
- Dielectric environment

Decay channels: - radiative $h\nu$
- non-radiative e-h pair

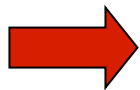
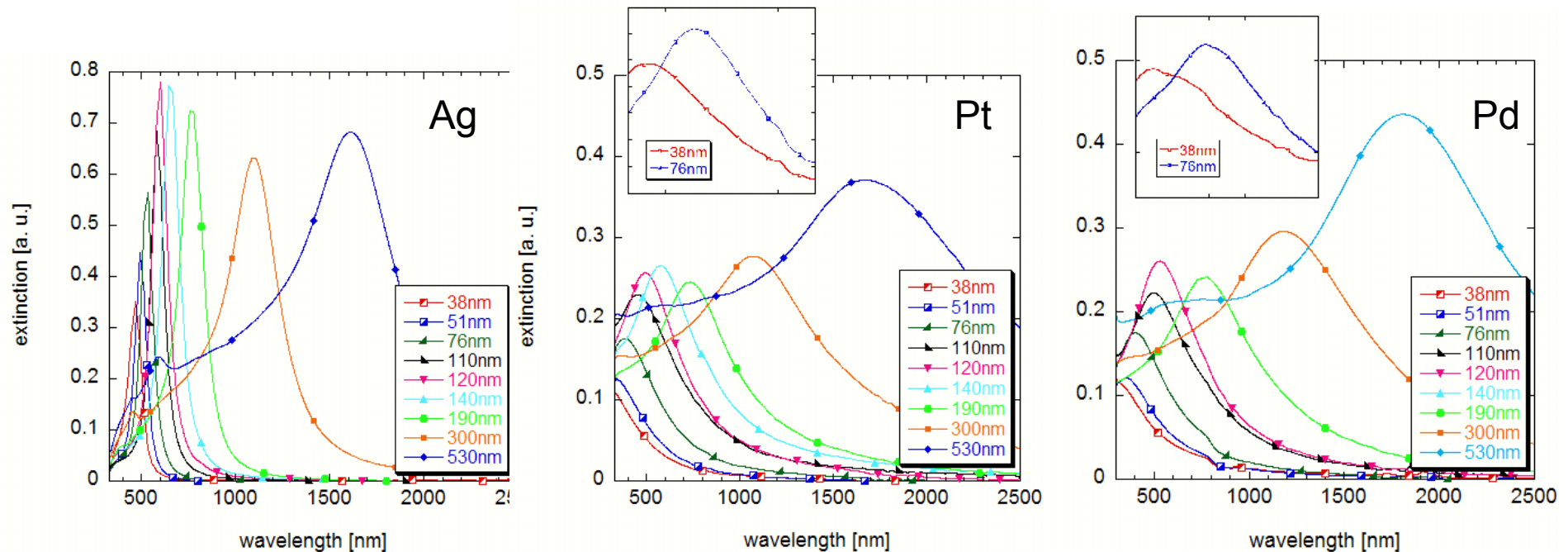
Plasmon mediated chemistry:

- photon induced e-h pairs (mediated by plasmons)
- tunneling of excited e^- into matching LUMO-orbital of adsorbate
- reaction control via LSPR
- preferably on catalyst material

 Non-radiative decay preferred!



Do Pt and Pd support LSPRs?



Yes!

- Spectra obtained by extinction spectroscopy
- Broad resonances for Pt and Pd
- About 50% lower extinction as compared to Ag

C. Langhammer et al., Nanoletters, Jan 2006

Plasmoner i metaliska nanopartiklar

