

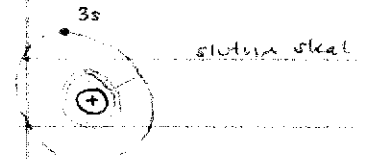
Föreläsning 11

Fasta tillståndets fysik

Som exempel på ett fast ämne ska vi välja Na, inte särskilt praktiskt använt, men ett bra ur pedagogiska synpunkt.

Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$
slutna skal

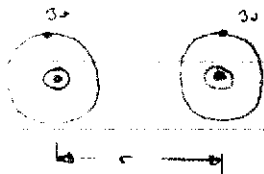
enkel bild. av Na-atom:



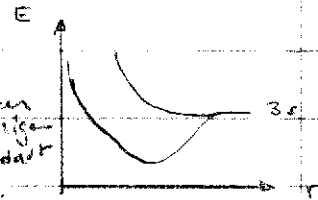
Na-metall innehåller $\approx 10^{23}$ atomer per m^3

Bilda Na-metall i steg:

2 atomer:



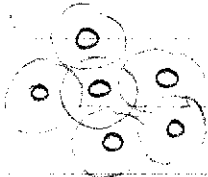
Obs!
Beteckningen
3s är egentligen
tillämpat endast
för atomer.



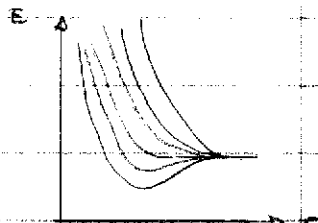
Stort avstånd inget över-
lapp mellan 3s-vågfunktioner
ingen splitting.

Knäppare avstånd: överlapp
splittring av 3s-nivåerna
pot. mer komplicerat potential
Dessa ryms det lägre klist.
2 elektroner (4s)

6 atomer:

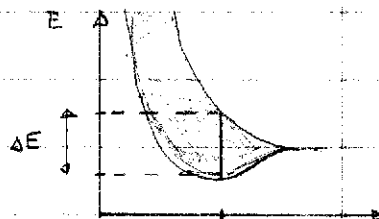


3s-elektronerna
"glöms" från
vilken atom de
härstammar.



Sex nivåer
De tre nedersta ockuperas

Många atomer:



Kvasikontinuerligt.
För givet atomavstånd
mellan närmaste grannar
finns det ett Schr. ener.
inom ΔE .

Halva detta band är
ockuperat av elektroner.

Den samlade mängden av 3s-elektroner rör sig i en potential
som ges av jonerna.

Tidigare har vi studerat frielektrongasen och man kan teoretiskt
beräkna ett antal fysikaliska egenskaper som en sådan har
såsom E_F , elektrisk och termisk ledningsförmåga, specifikt värme.
En jämförelse med experimentella resultat ger oss en hel del
metaller går ett beskriva med hjälp av frielektronmodellen.

Exempel på delta är: Na, K, Al, Pb ... enkla metaller med
slutna skal innanför valenselektronen.

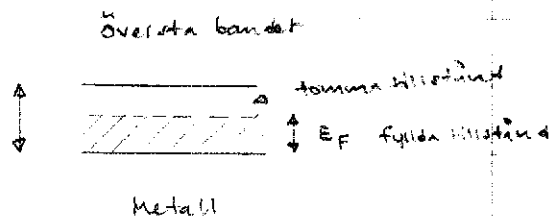
Av de 92 naturliga elementen är 66 metalliskt och av dessa är 20 enkla. De 40 andra är s.k. övergångsmetaller med mer än ett oöfyllt skal: ex Fe, W, Ni, ...

Metaller karakteriseras av: god elektrisk och termisk ledn. förm., ogenomsårbarhet, hög reflektans, mekanisk elasticitet.

Isantliga dessa fall är det förekomsten av lätttrörliga elektroner som är förklarande, men vad är orsaken till att det finns lätttrörliga elektroner i vissa material och inte i andra?

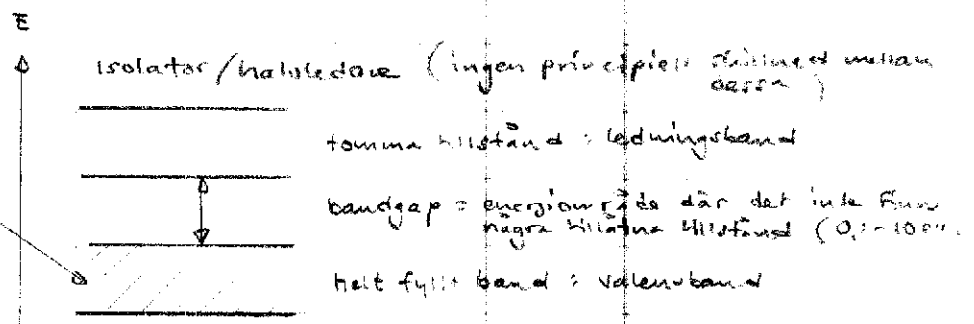
Schematisk bild.

$T=0$



$T=0$

Översta bandet som är oöppat



Lätttrörlighet hos elektronerna kräver att det finns tomma (tillstånd) tillstånd infinitesimalt nära de ockuperade tillstånden.

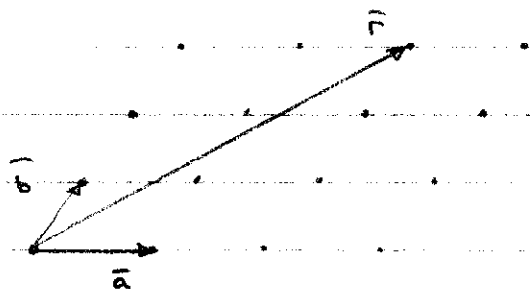
I frielektronmodellen kan inte bandgap finnas. Visserligen är de tillstånd energinivåerna diskreta, men vid makroskopiska utsträckningar (L_x, L_y, L_z) är energisteg mellan närbelägna tillstånd mycket liten.

Bandgap kan förklaras med att ta hänsyn till att elektronerna känner av den periodiska potential som jonerna gör uppkop till. Atomstrukturen studeras i kristallografi.

Kristallografi. Kristallstruktur = gitter + bas.

Gitter = en oändlig uppsättning punkter arrangerad så att varje punkt har identisk omgivning.

2 dim:



$$\vec{r} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b}$$

n_1 och n_2 är heltal

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ är basvektorer.

3 dim:
$$\vec{r} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

Det finns 14 olika sätt att arrangera identiska punkter.

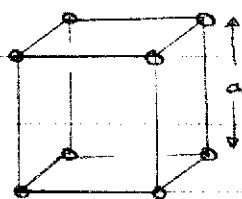
Man talar om 14 Bravaisgitter.

Kubiska gitter är vanliga och enkla.

Tre typer:

enhetcell

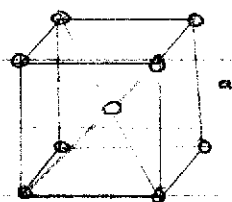
1) enkelt kubiskt gitter (sc)



kubkant a = gitterkonstant

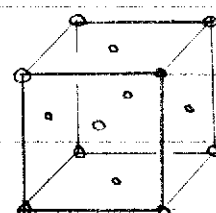
$$8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \text{ gitterpunkt i varje enhetscell.}$$

2) rymdcentrerat kubiskt gitter (bcc)



$$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ gitterpunkter i varje enhetscell.}$$

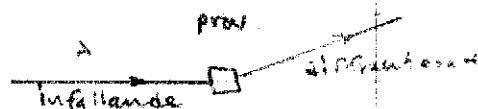
3) ytcentrerat kubiskt gitter (fcc)



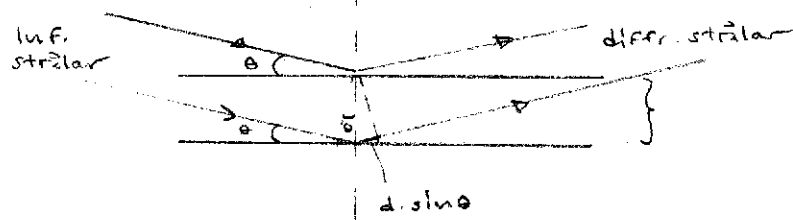
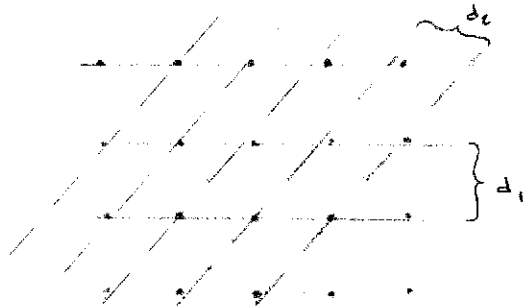
$$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \text{ gitterpunkter i varje enhetscell.}$$

Kristallstrukturen får man genom att tillordna varje gitterpunkt en eller flera atomer.

Hur bestämmer man kristallstruktur och gitterkonstanter?
 Med diffraktionsexperiment. λ är av storleksordningen $5\text{\AA}$
 vilket innebär att den diffrakterande våglängden λ ska vara
 röntgenvåglängder.



Till skillnad från vad vi är van vid från optiken är det
 diffrakterande provet tredimensionellt. Atomerna sprider den
 infällande röntgenstrålningen. Man kan uppfatta detta som
 om provet bestod av ett antal delvis genomskinliga speglar.



Vägskillnad: $2d \sin \theta$

Villkor för konstruktiv interferens:

$$2d \cdot \sin \theta = n \lambda \quad (\text{Braggs lag})$$

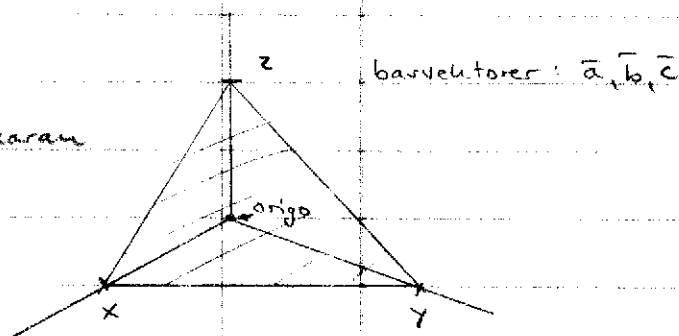
En RFFig metod för att bestämma d för olika planvaror är
 att definiera planvarans Millerindex.

Vi kan skriva om Braggs lag på följande form av skill
 som framgår senare

$$2 \frac{d}{n} \cdot \sin \theta = \lambda$$

Millerindex (hkl)

- 1) Studera två närbelägna plan i plancharan
- 2) Placera origo i det "bakre" planet
- 3) Bestäm skärningspunkterna x, y, z för det andra planet
- 4) Bestäm $\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}$
- 5) Invertera: $\frac{a}{x}, \frac{b}{y}, \frac{c}{z}$
- 6) Multiplicera med minsta gemensamma nämnare $\Rightarrow h, k, l$ (heltal)

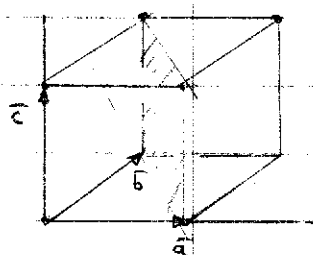


exempel

skärningspunkter $1, 1, \infty$

invertera: $1, 1, 0$

$\therefore (hkl) = (110)$



Allt detta "krångel" leder till beteckningen (kubiska gitter)

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

d_{hkl} = avståndet mellan närbelägna plan i plancharan med Millerindex (hkl)

I strukturen ovan ser vi om vi betraktar längs z

(220)

(110)

Det är uppenbart att det inte finns någon (220)-planchara eftersom denna inte går igenom några gitterpunkter. Vi kan dock bygga in interferens av högre ordning n i Braggs lag genom att ersätta d med $\frac{d}{n}$.

$$2 d_{110} \cdot \sin \theta = 2 \lambda$$

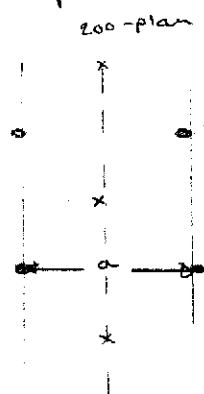
$$\Rightarrow 2 \frac{d_{110}}{2} \cdot \sin \theta = \lambda \Rightarrow 2 d_{220} \cdot \sin \theta = \lambda$$

⑥

Om vi tar hänsyn till möjligheten att bygga in interferens av högre ordning i hkl så är alla kombinationer av hkl tillåtna i en enkel kubisk struktur.

Detta är inte fallet i mer komplicerade strukturer såsom bcc- och fcc-strukturer.

bcc sedd från ovan:



100-plan

Någon planskara där avst. mellan närbelägna plan

är så stor som a finns

inte "centraltomerna" x

ligger i en planskara

mitt emellan (100)-planen.

Detta geometriska faktum kan uttryckas med hjälp av den s.k. strukturfaktorn. Denna ger att

bcc: $h+k+l$ måste vara ett jämnt tal

fcc: hkl måste vara alla udda eller alla jämna.

Nu har vi kunskap för att förstå principerna för hur man experimentellt bestämmer kristallstrukturer med hjälp av diffraktionsexperiment. Förutom röntgenstrålning kan man använda elektroner eller neutroner.

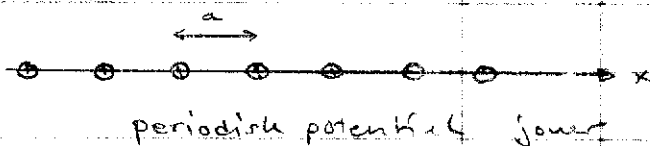
Bandgap:

För att kunna förklara varför vissa ämnen är metaller och andra är isolatorer behöver vi, som vi sajt tidigare, begreppet bandgap.

Det är omöjligt att förstå bandgap, förbjudna energiområden, enbart genom att använda frielektronmodellen.

Vi måste ta hänsyn till att elektronerna rör sig i ett rum där potentialen varierar.

Endimensionell illustration:



För små värden på k (dvs. stora λ) uppfattar elektronen potentialen som konstant ($\approx$ medelvärdet av potentialen).

$$\Rightarrow E \sim k^2 \text{ (för små } k \text{)}$$

När k ökar (λ minskar) kommer elektronerna att i allt högre utsträckning känna av att potentialen varierar i rummet.

Speciellt märkligt blir detta för $k = \frac{\pi}{a}$ ($\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi \cdot a}{\pi} = 2a$).

Elektronerna uppfattar jonerna som spridare.

Allmänt:

$$\Psi(x) = A \cdot e^{ikx} \pm B \cdot e^{-ikx}$$

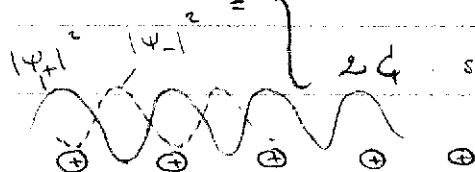
om $k = \frac{\pi}{a}$ så gäller att $A \gg B$

$$k = \frac{\pi}{a} \Rightarrow \Psi(x) = C \left[e^{i \frac{\pi}{a} x} \pm e^{-i \frac{\pi}{a} x} \right] =$$

$A=B=C$

$$|\Psi|^2 = \begin{cases} 4C^2 \cdot \cos^2 \frac{\pi}{a} x \\ 4C^2 \cdot \sin^2 \frac{\pi}{a} x \end{cases} \quad |\Psi|^2 = \begin{cases} 4C^2 \cos^2 \frac{\pi}{a} x & (+) \\ 4C^2 \sin^2 \frac{\pi}{a} x & (-) \end{cases}$$

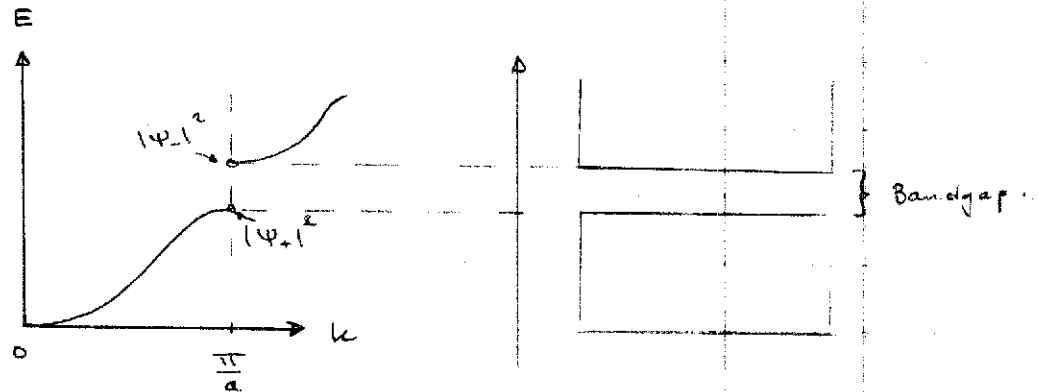
electron-tätheten



$|\Psi_+|^2$: elektronerna och jonerna nära varandra
i medeltal $\Rightarrow$ låga potentiell energi

$|\Psi_-|^2$: elektronerna ligger i medeltal långt ifrån
jonerna $\Rightarrow$ höga potentiell energi.

I båda fallen är $k = \frac{\pi}{a}$ och kinetiska energin samma.



För att bestämma sambandet mellan E och k (dispersionsrelationen) i området mellan små k och $k = \frac{\pi}{a}$ krävs detaljerad lösning av Schrödingerekvationen (periodisk potential)

Vad händer då elektronen utsätts för ett yttre pålagt elektriskt fält $\vec{E}$. Man kan visa att:

$$(\vec{F} = -e\vec{E})$$

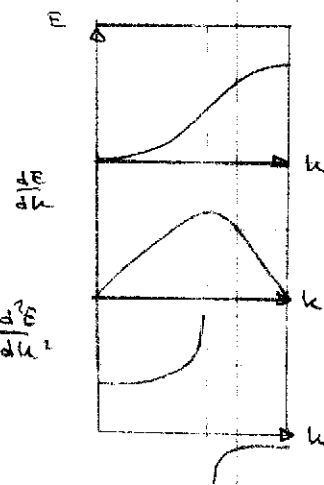
$$a = \frac{F}{\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 E}{dk^2}} = \frac{F}{m^*}$$

m^* kallas effektiva bandmassan.

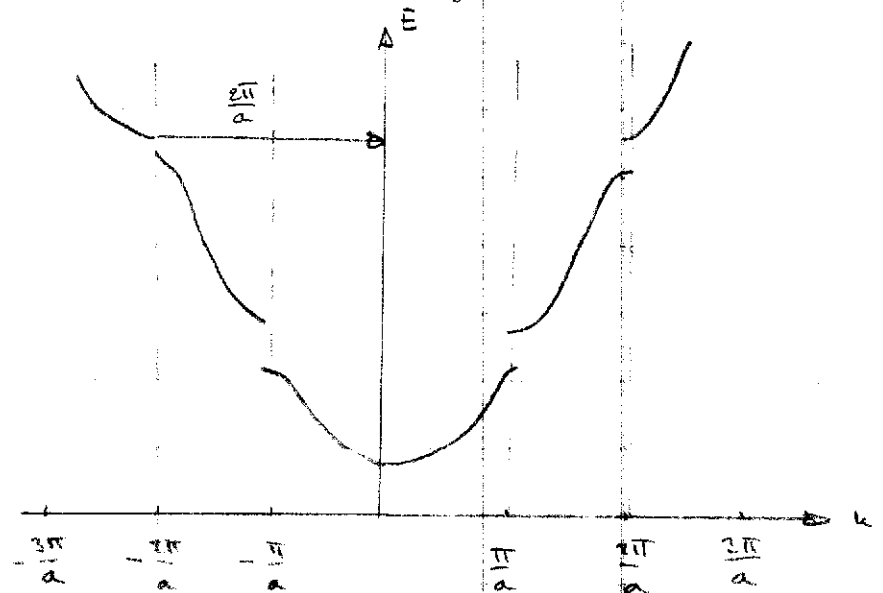
$$\text{ex. } E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Rightarrow \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \Rightarrow m^* = m$$

för $E \sim k^2$ får vi $m^* = \text{konstant}$
om prop. konst är $\frac{\hbar^2}{2m}$ får vi $m^* = m$
I annat fall annat värde på m^* .

Notera förekomsten av
negativ effektiv massa.



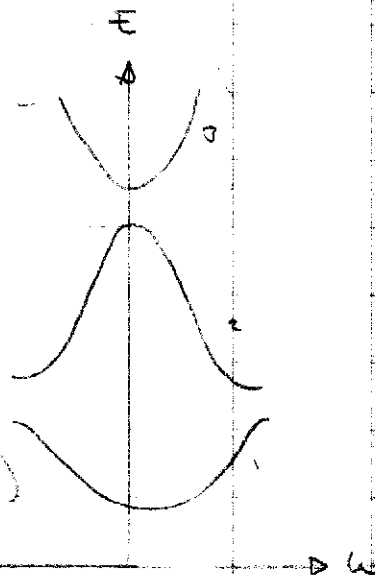
En lösning av Schrödingerekvationen kan ge följande resultat.



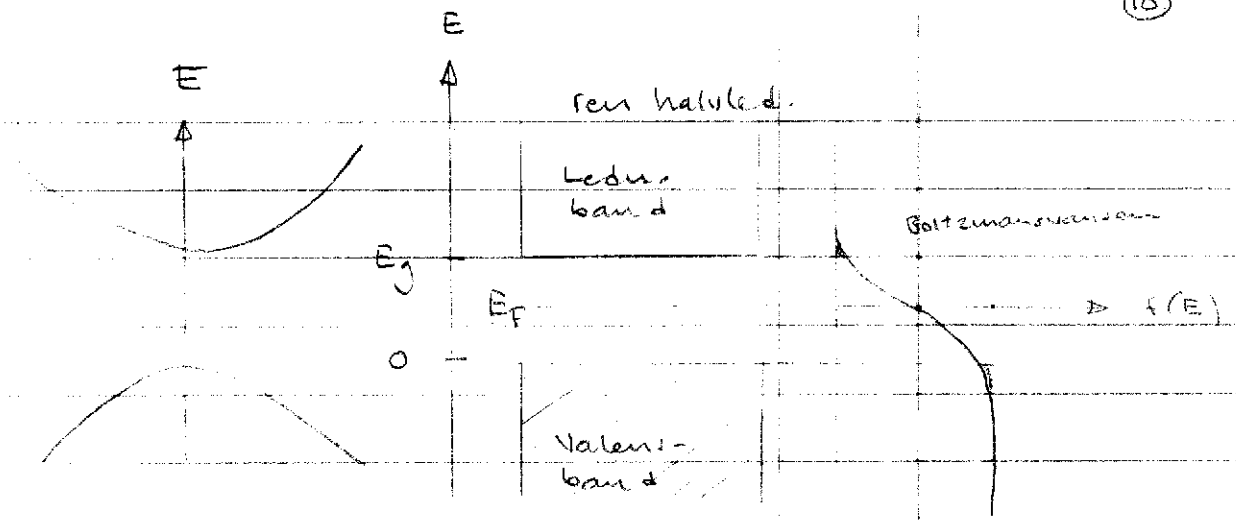
här är inte den vanliga impulsen (som för fria partiklar) utan kallas kristallimpulsen. Man kan visa att denna måste bevaras såväl som $p \pm n \frac{2\pi}{a}$ vid övergång från ett band till ett annat. Därför är det möjligt att rita ut figuren ovan enligt

Varje band har plats
för 2 elektroner

Udda antal valenselektroner
ger halvfyllda band (metall)
medan jämnt antal ger
halfyllda band (isolator/halvled)



Låt oss undersöka halvledaren Si närmare.
Si har fyra valenselektroner och fyller vid $T=0$
de två understa banden helt.



Konduktiviteten σ i en metall ges av uttrycket

$$\sigma = n e \mu_e$$

n = elektronfätheten

μ_e = mobiliteten för elektr.

För en halvledare tar vi också hänsyn till förehavelsen av hål

$$\sigma = n e \mu_e + p e \mu_h$$

p = håltätheten

μ_h = mobilitet för hål

Beräkna n och p !

Sannolikheter:
(E i ledn. bandet)

$$f(n) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \approx e^{-(E-E_F)/kT} \quad \text{om } (E-E_F) \gg kT$$

(E i valensbandet)

$$f(p) = 1 - f(n) = 1 - \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \approx e^{(E-E_F)/kT}$$

om banden är paraboliska [från ex. $N(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$]

$$\frac{N_n(E)}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2}$$

hållan E_g i botten av ledn. band

$$\frac{N_p(E)}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} |E|^{1/2}$$

negativa E .

Antal = Tilt. täthet · Ford. fl. u.

Tätheten av el. i ledningsbandet

ledn. bandet är oändligt stort
och exp. funktionen $e^{-(E-E_F)/kT}$

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_g}^{\infty} (E - E_g)^{1/2} e^{-[(E - E_F)/kT]} dE =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (kT)^{1/2} e^{(E_F - E_g)/kT} \int_{E_g}^{\infty} \left(\frac{E - E_g}{kT} \right)^{1/2} e^{-(E - E_g)/kT} dE$$

$$\left[x = \frac{E - E_g}{kT} \Rightarrow dx = \frac{dE}{kT} \quad dE = kT \cdot dx \quad \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{1}{2} \pi \right]$$

$$\Rightarrow n = 2 \left(\frac{m_e kT}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(E_F - E_g)/kT} =$$

$$= n_0 e^{(E_F - E_g)/kT} = n_0 e^{-(E_g - E_F)/kT}$$

Med $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = m$ och $T = 300 \text{ K}$ gäller $n_0 = 2.5 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$

Lämpligt hjälperande skrivsätt

$$n = 2.5 \cdot 10^{25} \left(\frac{m_e}{m} \frac{T}{300} \right)^{3/2} e^{-(E_g - E_F)/kT}$$

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^0 -E^{1/2} e^{(E - E_F)/kT} dE$$

$$\Rightarrow p = 2.5 \cdot 10^{25} \left(\frac{m_h}{m} \frac{T}{300} \right)^{3/2} e^{-E_F/kT}$$

Gäller även för dopade halvledare. E_F varierar.

om vi gör förändringen att $m_e^* = m_h^*$ så
 ligger E_F mitt i bandgapet för en ren halvledare

$$\Rightarrow n = p = n_0 e^{-E_g/4T}$$

$$\Rightarrow \sigma = ne\mu_e + pe\mu_h = ne(\mu_e + \mu_h) = \text{konst} \cdot e^{-E_g/4T}$$