

Forberedelse til eksamen i FYS3410

Furkan Kaya

May 2017

1 Introduksjon

Eksamen består av 17 spørsmål, som alle bør besvares etter beste evne, før man ankommer eksamen-plassen. Man skal trekke et av dem, forberede seg i 30 minutter og så fremføre sin presentasjon/svar på spørsmålet. Denne presentasjonen skal vare i 15 minutter, før en periode på 10-12 minutter hvor eksaminator og ekstern sensor spør om pensum. Så brukes de siste minuttene til en intern diskusjon om kvaliteten på eksaminandens fremføring. Alt i alt skal man være der i rundt en time. I teksten under vil jeg sette hvert spørsmål som egen seksjon og jeg benytter meg av Kittel sin bok (som er pensum) og annet jeg kan finne om kondenserte fasers fysikk/faste stoffers fysikk.

Kondenserte fasers fysikk - en definisjon:

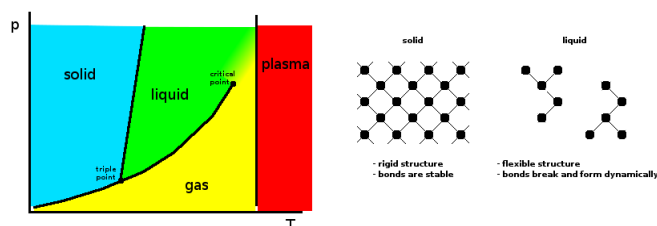


Figure 1: En oversikt over fasene, viktige punkter som det kritiske punkt, trippelpunktet

Vi har et fasediagram i figur 1. Det viser trykk (y-aksen) og temperatur (x-aksen) forholdet, samt hvor de forskjellige fasene fremkommer. Enkelt-fase regioner er skilt fra hverandre med faseovergangslinger. Hver gang det er likevekt, så kan atomene/molekylene krysse fra en fase til en annen. Et spesialtilfelle er trippelpunktet: her er alle fasene (altså flytende, solid og gass) i likevekt med hverandre.

På figuren har vi fire faser: flytende, solid, gass og plasma. De tre første er de tradisjonelle fasene. Solid og flytende er referert som kondensert materie. Det er her navnet kommer fra og vi ser en ørliten forskjell mellom dette emnet og det på NTNU. Kondenserte faser er resistente til sammenstrykking eller kompressjon. Plasma er et spesialtilfelle og er en inert gass som brukes i mange prosesser i halvlederteknologien for eksempel. Her er entalpien til systemet høyt nok til å ionisere individuelle atomer: materialet består av atomkjerner og frie elektroner.

Forholdet solid versus flytende:

For begge er de interatomiske distansene bestemt av enten Coulomb potensiale (ioner) eller av par potensialer (kovalente materialer). En substans er flytende hvis styrken til de interatomiske interaksjoner er sammenlignbart med kT (Boltzmanns konstant). Her kan da bånd enkelt brytes og dannes, noe som gir en fleksibel struktur.

2 Spørsmål 1: Periodic lattices as a result of the interatomic force balance in solids: basic ideas and specific interpretation of the ionic bonding, e.g. in NaCl

På norsk lyder oppgaveteksten som følgende: Periodiske gitter som et resultat av interatomisk kraft balanse i solider: grunnleggende ideer og spesifikk tolkning av ionisk binding, som i for eksempel NaCl.

Først begynner jeg med en del bakgrunnsinformasjon om periodisitet og gitter for materialer før jeg forklarer den interatomiske balansen. Begreper som må forklares:

- Cohesive energi: energi som kreves for å bryte opp krystaller til nøytrale frie atomer
- Gitter energi: (ioniske krystaller), energi som kreves for å bryte opp krystaller inn i frie ioner.

Et ideelt krystall er bygget opp av underenhet eller enhetscelle som går igjen i hele materialet med repeterende mønster. I denne konteksten, altså emnet, er en enhetscelle omtalt som basis. Sett med matematiske punkter som basisen er lagt til på kalles for gitter (eller lattice på engelsk). Avstanden mellom basisene kalles for gitterkonstant og er en viktig verdi i materialteknologien.

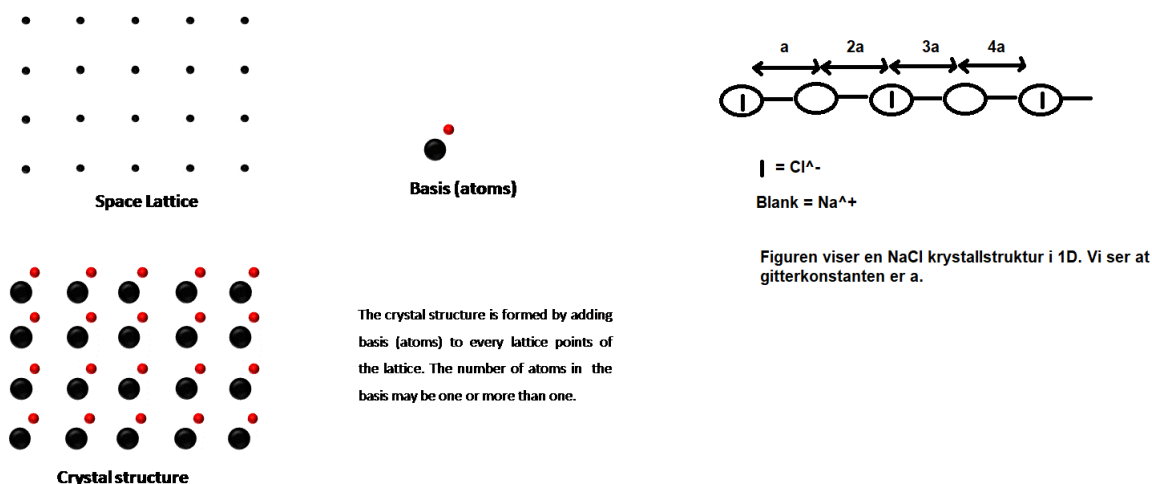


Figure 2: Gitter, basis og krystallstruktur i en figur

Gitteret i tre dimensjoner kan bli definert med tre translasjonsvektorer: a_1, a_2, a_3 , slik at arrangementet av atomer i krystallen ser lik ut når sett fra punkt r som sett fra ethvert punkt r' . Formelen

for r' er da:

$r' = r + u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3$, hvor det også må tilføyes at u_1, u_2, u_3 er tilfeldige integre. Gitteret er primitivt hvis $a_1 * (a_2 \times a_3)$. Eksempel på en primitiv celle er Wigner-Seitz celle.

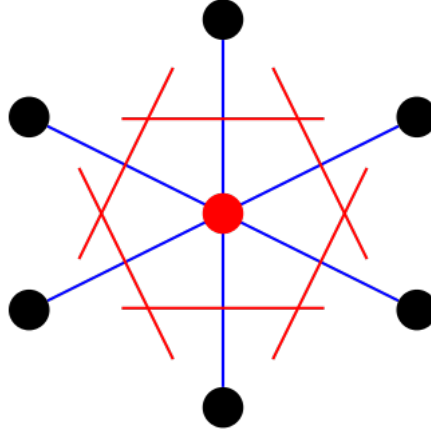


Figure 3: Viser hvordan en Wigner-Seitz celle konstrueres

En Wigner-Seitz celle er en enhetscelle som kun inneholder et gitterpunkt. Området rundt figuren kalles for en Brillouin-sone. Man velger et gitterpunkt og så drar man linjer til alle de nærmeste gitterpunktene. Ved midtpunktet drar man en normal og får en figur (eller sone), som man kan se på figur 3.

Av former for enhetsceller har vi i 3D: trikliniske (1 gitter), monokliniske (2 gitter), ortorombiske (4 gitter), tetragonal (2 gitter), kubiske (3 gitter) og heksagonal (1 gitter). Disse har forskjellige atomiske pakningsfaktorer (eller atomtetthet), forskjellige antall nærmeste naboatomer og radius. Natriumklorid-strukturen, som er eksempelstrukturen i oppgaven, er en form kubisk krystallstruktur, face-centered cubic (FCC). Basisen er et Na^+ og et Cl^- -ion. Og kantlengden til kuben er på 1 Ångstrøm. NaCl-strukturen er ikke kun begrenset til den ioniske bindingen mellom Natrium og Klorid, men KCl og LiH har også en slik struktur. Jeg må også legge til at andre former for kubiske krystallstrukturer er: simpel (0.54 pakningsfaktor), BCC (0.68 pakningsfaktor) og FCC altså (0.74 pakningsfaktor).

Man bruker scanning tunneling microscope (STM) til å for eksempel se på (111) overflaten til en FCC-platinum (eksempelet som brukes i boken og hvor man kan klart se den periodiske krystallstrukturen). Et viktig verktøy for krystaller er noe som heter for stacking (eller stabling på norsk da om man vil). FCC er stablet på denne måten: ABCABCABC..., mens HCP er stablet slik: ABABAB.... Hvis det forekommer brudd i disse oppsettene, kaller vi det en defekt som heter for "stacking fault".

Så ser vi litt nærmere på oppgaven: Hva holder et krystall sammen? Kittel svarer som følgende: Den attraktive interaksjonen mellom de negative ladningene til elektronene og de positive ladningene til kjernen er helt avhengige for samholdet til soliden. Magnetiske og gravitasjonelle krefter er henholdsvis marginale og neglisjerbare. De observerte forskjellene mellom solider kommer av forskjeller i fordeling av valenselektroner og ionekjerner. Man har i pensum inerte gasser, ioniske krystaller og solider med kovalente bånd å forholde seg til. Jeg har delvis gått igjennom den generelle bakgrunnen

og bør egentlig forholde meg til ioniske krystaller grunnet tidspress. Samtidig indikerer oppgaveteksten at vi bare skal se på solider og derav impliserer at vi skal ignorere inerte gasser.

Ioniske krystaller er dannet av positive og negative ioner. Det ioniske båndet kommer av elektronegative interaksjoner av motsatt ladete ioner. Man måler om det er et ionisk eller kovalent bånd ved å se på forskjell i elektronegativitet mellom det grunnstoffet med høyest verdi og det med lavest verdi. Elektronegativitet er et atoms evne til å tiltrekke seg elektroner i et kjemisk bånd.

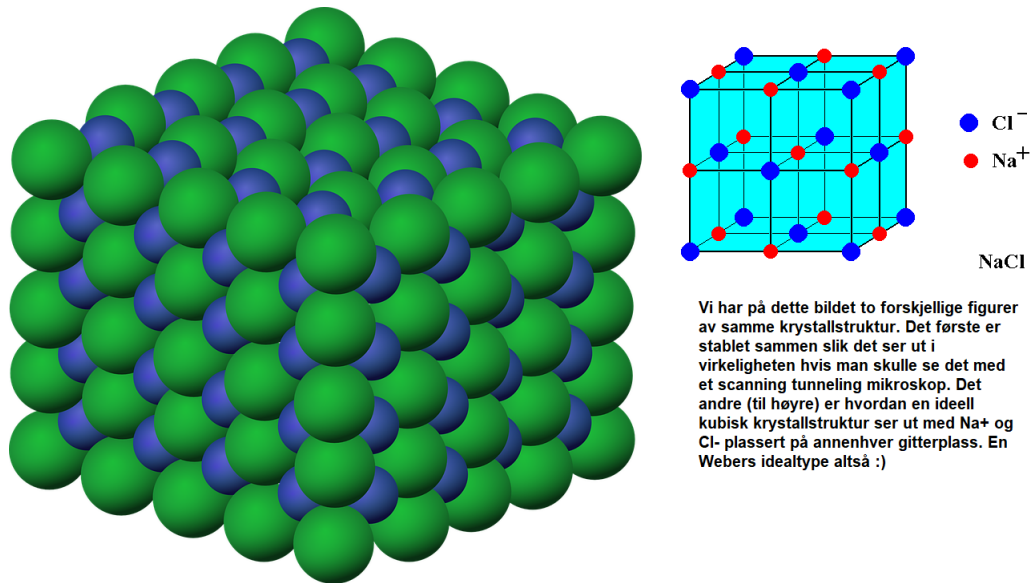


Figure 4: En krystallstruktur med NaCl og viser hvordan NaCl ser ut i praksis og en kubisk enhetscelle med alternerte Na og Cl

Likningen for gitter-energien er gitt av:

$$U = E_{coulomb} + E_{repulsiv} \quad (1)$$

Gitter-energien til et krystallinsk (altså periodisk) solid er definert som energien til dannelsen av krystaller fra serparate ioner. For en alternerende kjede er Na^+ og Cl^- (fra figur 2) har vi:

$$E_{coulomb} = \frac{e^2}{4 * \pi * \epsilon_0} * \frac{z_A * z_B}{d} * 2 \ln 2 \quad (2)$$

$2 \ln 2$ er Madelungkonstanten for 1-dimensjon (1D). For 3D setter vi det bare lik A. Madelungkonstanten er hovedbidraget til bindingsenergien til ioniske krystaller og er elektrostatiske.

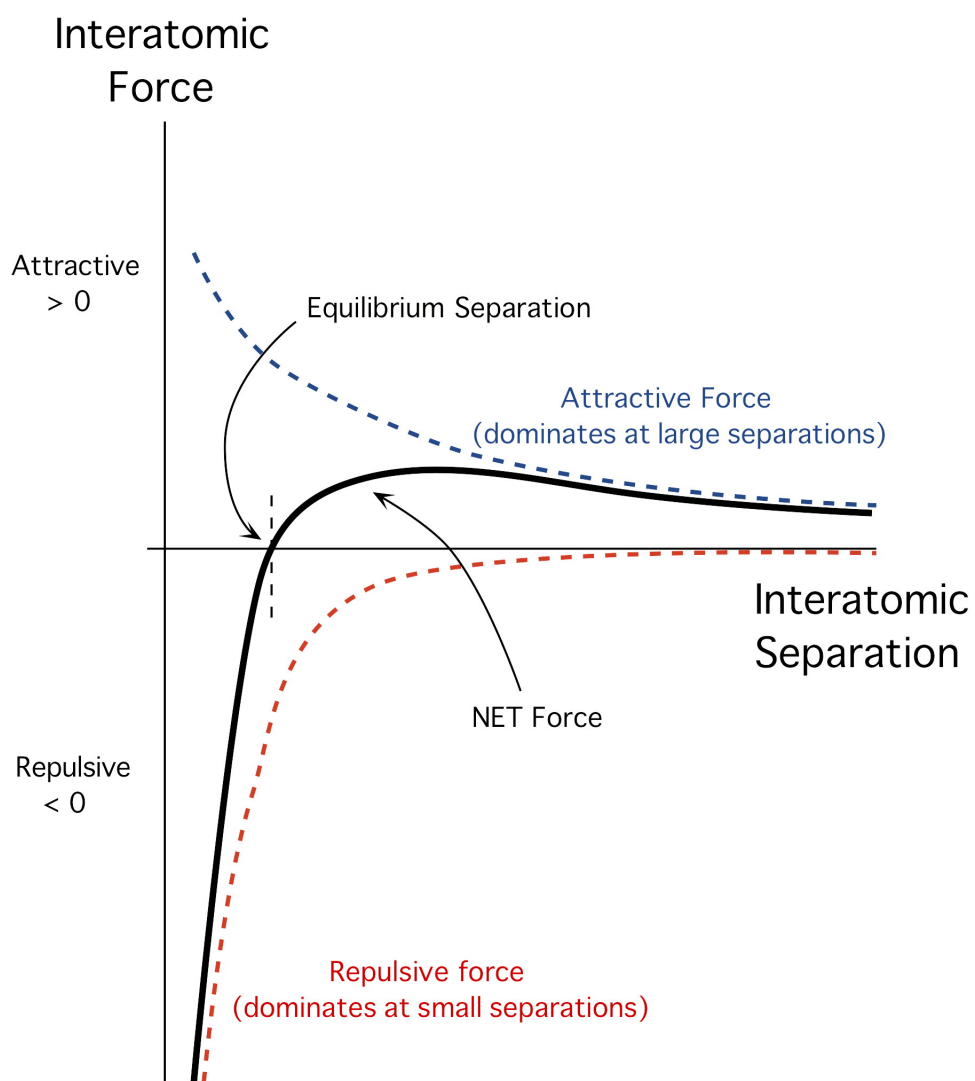


Figure 5: viser interatomiske krefter og forholdet mellom attraktiv og repulsive krefter

$E_{repulsiv}$ er lik $E_{coulomb}$, men med motsatt fortegn slik at vi har en balanse (eller interaktivt kraft-balanse som det heter i oppgaveteksten). U blir:

$$U = \frac{e^2}{4 * \pi * \epsilon_0} * \frac{z_A * z_B}{d_0} * A * (1 - \frac{d^*}{d_0}) \quad (3)$$

d^* er fra Born-Mayer ligningen for repulsive ledd og er oppgitt som 0,345 Å. Born-Mayer for NaCl blir da:

$$U = 1390 * \frac{(1) * (-1)}{2,78} * (1,748) * (1 - \frac{0,345}{2,78}) \quad (4)$$

$$U = -765 \frac{kJ}{mol} \quad (5)$$

som er ganske nærme den eksperimentelle verdien på - 788 kJ/mol. Så skal vi se litt nærmere på Madelungkonstanten. Definisjonen er:

$$\frac{\alpha}{R} = \sum_j \frac{(\pm)}{r_j} \quad (6)$$

hvor r_j er distansen fra j-ionet til referanse-ionet og R er nærmeste nabodistanse.

Vi har altså den alternerende rekken av Na^+ og Cl^- - Det gir oss:

$$\frac{\alpha}{R} = 2 * [\frac{1}{R} - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \frac{1}{4R} +] \quad (7)$$

eller

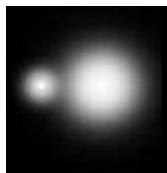
$$\alpha = 2 * [1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} +] \quad (8)$$

Faktoren 2 er der fordi det er to ioner ved siden av ionet på r_j (et på hver side). Denne serien er det samme som:

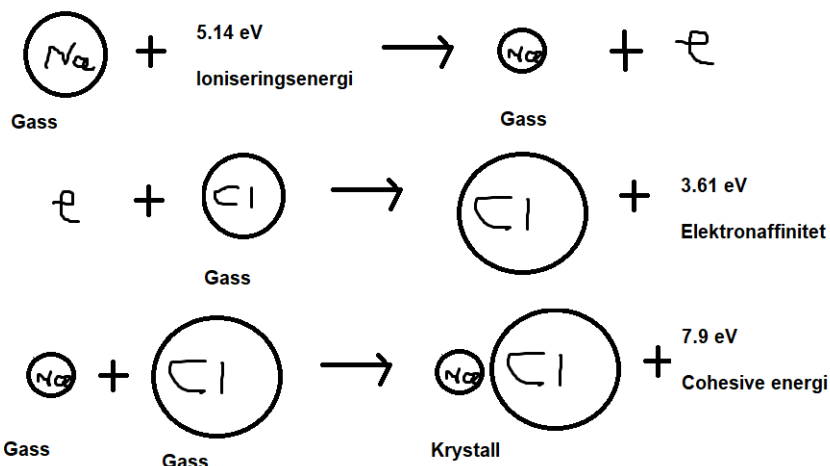
$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \quad (9)$$

Det gir da tabellverdien for Madelungkonstanten på $\alpha = 2 \ln 2$. I 3D er det langt vanskeligere å få til disse utregningene av Madelungkonstanten, men man benytter seg av dataprogrammer for å få det til.

Fra en annen bok har vi som følgende om temaet. NaCl er mer stabilt enn Na og Cl ioner hver for seg. Derfor ønsker de å gå sammen. I praksis har vi at når natrium mister et valenselektron, så blir det mindre. Mens kloridet som tar opp et valenselektron blir større. Når reaksjonen har skjedd, blir de holdt sammen av en elektrostatiske kraft. Paulis eksklusjonsprinsipp har en viktig rolle i den repulsive kraft. For å forhindre en bryting av eksklusjonsprinsippet. så øker den potensielle energien veldig hurtig.



Natrium (til venstre) og klorid til høyre. De er bundet sammen og vi ser at klorid har blitt større, mens natrium har blitt mindre.



Energien til per molekylenheter av et krystall av Natriumklorid er $(7.9 - 5.1 + 3.6) = 6.4 \text{ eV}$ lavere enn energien til separerte nøytrale atomer. Gitterenergien med hensyn til separerte ioner er 7.9 eV per molekylenheter. Alle verdier på figuren ovenfor er eksperimentelle verdier.

Figure 6: Til venstre ser vi et LEED-image av en binding av Natrium og klorid. Vi ser at natriumet har blitt mindre, mens kloridet har blitt større. Til høyre har vi hvordan bindingen foregår i form av energi

3 Spørsmål 2: Defects in crystals; reasons to occur; equilibrium concentration as a function of temperature and strain for vacancies; examples of properties governed/affected by defects.

Oppgaveteksten på norsk: Defekter i krystaller: grunnen til at de skjer/forekommer, likevektsskonsentrasjon som funksjon av temperatur og strain for vacancies. Eksempler på egenskaper bestemt/påvirket av defekter

Vi redegjør først for hva defekter er, før vi går nærmere inn på de forskjellige aspektene ved spørsmålet. Et perfekt krystall er en idealtipe. Det finnes ikke perfekte krystaller i virkeligheten. En årsak til at naturlige krystaller er imperfekte er at ved lav temperatur (som romtemperatur), så er det slik at atomer i solider er relativt umobile. Og det er av den grunn vanskelig å fjerne imperfeksjoner som blir introdusert i krystallen i løpet av prosesseringen. Defekter er veldig viktige fordi det er de som gir ingeniører muligheten til å lage materialer som moderne komponenter trenger.

Vi har 4 klasser med defekter innordnet etter deres dimensjon. Den 0-dimensjonale defekten forstyrrer krystallmønsteret ved et isolert sted og kalles for en punktdefekt. Vi skiller her mellom intrinsiske punktdefekter som forekommer i rene materialer og ekstrinsiske punktdefekter som er sørget for av solute eller urenhetsatomer. Vi husker fra materialteknologien at intrinsiske defekter blir skapt når et atom mangler fra sin posisjon og det blir skapt en vacancy. Ved ekstrinsiske har vi at urenhetsatomer går inn i et hovedatom (altså forholdet solute og solvent). Vi har to former for ekstrinsiske punktdefekter: interstitial og substitusjonell. Se figuren nedenfor.

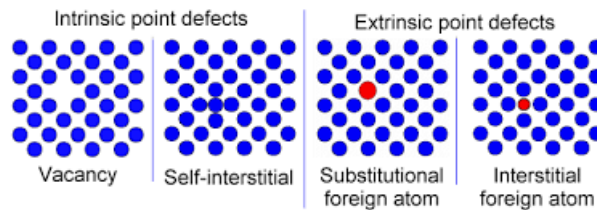


Figure 7: Imaget kalles for Gang of four og skal symbolisere de fire former for punktdetekter. Ellers snakker bildet for seg selv

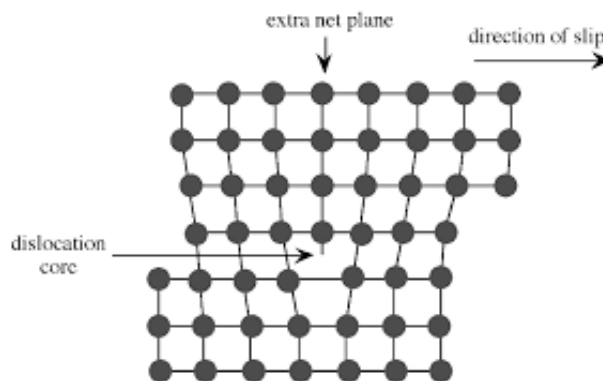


Figure 8: viser en dislokasjon gjennom et krystall

Så går vi over til linjedefekter. Disse er en-dimensjonale og kalles for dislokasjoner. En dislokasjon er en linje gjennom krystallet hvor krystallografisk registry er tapt. Deres prinsipielle rolle er å kontrollere yield styrke og påfølgende plastisk deformasjon av krystallinske solider ved vanlige temperaturer. Dislokasjon er også medvirkende i vekst av krystaller.

De to-dimensjonale defektene er: korngrenser, twins og stacking faults. Korngrenser er interfasen mellom to korn i et polykrystallinsk materiale. Stacking faults er at man stabler krystallplan feil, eller som man ikke skulle gjøre. Twin grense er en liten misorientasjon som eksisterer mellom to krystaller. Disse tre formene har to ting til felles. En er at siden de er overflater i et krystall, så har de en spesiell atomisk struktur som avhenger av overflaten. To er at de har positiv energi.

Den fjerde og siste formen for defekt er såkalte volumdefekter. De er tre-dimensjonale aggregater av atomer eller vacancies. Man inndeler dem i fire klasser ut i fra en kombinasjon av størrelse og effekt på partikkel. De fire kategoriene er: utfelling: som er en fraksjon av et mikron i størrelse og dekorerer krystallet. Deres funksjon er å øke styrken til strukturelle legeringer ved å fungerer som hindringer for bevegelsen til dislokasjon. dispersanter: er intensjonelt introdusert i mikrostrukturen og er større partikler som fungerer som en sekundær fase og i tillegg påvirker oppførselen til den primære fase. Inklusjoner: som er større og uønskede partikler som entrer systemet som jord (dirt på engelsk). De svekker styrken til strukturelle legeringer. Voids: den mest kjente av de tre-dimensjonale defekter. Er hull i solider dannet av fangede gasspartikler eller akkumulasjon av vacancies. Deres hovedeffekt er å senke den mekaniske styrken og promotere fraktur ved små loads.

Så skal vi se på likevektskonsentrasjonen som en funksjon av temperaturen. Her ser vi på modul IV som en mulighet ettersom vi lagde nettopp en slik figur der. For punktdefekter var det slik at vi introduserte urenheter i atomer. Det er dette som skjer når man doper en halvleder med fosfor også. Her har vi en måte å finne likevektskonsentrasjonen som en funksjon av temperatur på.

For halvledere har vi tre karakteristiske temperaturgrenser å forholde oss til. Disse er donor freezing out, full donor aktivasjon og overtaking av intrinsiske bærere. Grensene er dominert av henholdsvis lave, mellom og høye temperaturer. La oss se litt på de forskjellige situasjonene.

Utfrysing: $E_d \gg k_B T$ og lav temperatur.

Her er ikke den termale energien nok til å ionisere alle urenheter, men noen av dem er ionisert. Noe som betyr at deres elektroner er eksitert fra deres donornivåer E_d og inn til konduksjonsbåndet. $n \propto \exp(-E_d / 2k_B T)$.

Ekstrinsikk (mellomstadie temperatur) $E_d \ll k_B T \ll E_g$

I dette stadiet er alle donorer ionisert, men den termale energien er ikke nok til å eksitere elektroner langs det intrinsiske båndgapet. $n = \text{konstant}$.

Intrinsikke (høy temperatur): $E_g \ll k_B T$

Den termale energien er nok til å eksitere elektroner langs båndgapet og til å produsere intrinsikke ladningsbærere. Det følger skalareringen: $n \propto \exp(-E_g / 2k_B T)$

Vi bruker Silisium og har verdiene $E_d = 45 \cdot 10^{-3}$ og $E_g = 1.1$. Så finner vi likevektspunktet. For donor utfrysing har vi:

$$n_i \approx \exp\left(\frac{-E_d}{k_B T}\right) * N_C \quad (10)$$

Mens for intrinsikke halvledere energien halvert langs gapet, slik at:

$$n_i \approx \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right) * N_i \quad (11)$$

Kryssningspunktet er $N_D = N_C * \exp(\frac{-E_d}{k_B T})$ og $N_D = N_i * \exp(\frac{-E_g}{2k_B T})$ hvor N_D er urenhetskonsentrasjonen gitt på forhånd, og setter $N_C = N_i = 4.0 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. Dette gir oss:

$$T_0 = -\left(\frac{E_d}{k_B * \ln(\frac{N_D}{N_C})}\right) = 49,3K \quad (12)$$

$$T_1 = -\left(\frac{E_g}{k_B * \ln(\frac{N_D}{N_C})}\right) = 602,3K \quad (13)$$

Det betyr altså at for temperatur-grensene for donor utfrysing og intrinsikk får en likevektskonsentrasjon på $4,0 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. Før vi forklarer strain for vacancies, ser vi på en figur for likevektskonsentrasjon vs 1/temperatur (figur 9).

Når vi skal vurdere strain for vacancies, så har vi fra materialteknologien at dislokasjoner er nært relaterte til vacancies. Drivkraften til dislokasjoner er faktisk bevegelsen av vacancies gjennom et krystallgitter. Videre fører et stort antall dislokasjoner til plastisk deformasjon (noe som heter for slip på fagspråket). Plastisk deformasjon, er for sikkerhets skyld, permanent deformasjon av et materiale i motsetning til elastisk deformasjon, som er midlertidig deformasjon. De grunnleggende ideene

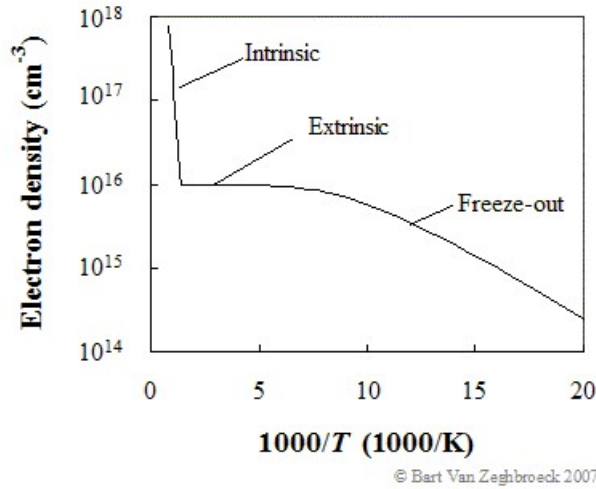


Figure 9: Figur som viser konsentrasjon av defekter i forhold til temperatur. Likevektspunktet ligger for de to endepunktene for den ekstrinsiske delen av grafen

i analysen av elastiske strain er gitt av Hookes lov, $F = k \cdot x$, som tilsier at i en elastisk solid er strain direkte proporsjonal til stress. Det gjelder kun for små strains. Den andre viktige loven å ta hensyn til er Newtons andre lov, $F = m \cdot a$. Strain er gitt i komponentformene: $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{xy}, e_{yz}, e_{xz}$.

Så ser vi litt på hvordan dette er i praksis. Vi har tre ortogonale vektorer: $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$, av enhetslengde som tilhører en solid som ikke har blitt utsatt for strain. Etter en deformasjon har forekommet får vi disse nye aksene:

$$x' = (1 + e_{xx})\hat{x} + e_{xy}\hat{y} + e_{xz}\hat{z} \quad (14)$$

$$y' = e_{yx}\hat{x} + (1 + e_{yy})\hat{y} + e_{yz}\hat{z} \quad (15)$$

$$z' = e_{zx}\hat{x} + e_{zy}\hat{y} + (1 + e_{zz})\hat{z} \quad (16)$$

Koeffisientene $e_{\alpha\beta}$ definerer deformasjoner og har verdier < 1 , hvis det er liten strain.

Så ser vi på et annet punkt, nemlig forflytningen til deformasjonen. Et atom er opprinnelig på:

$$r = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (17)$$

Forflytningen til deformasjonen er gitt av:

$$R = r' - r = x(x' - \hat{x}) + y(y' - \hat{y}) + z(z' - \hat{z}) \quad (18)$$

Dette er hvis deformasjonen er uniform. Jeg har kuttet ut formlene for om deformasjonen ikke er uniform og man må lete etter disse verdiene lokalt. Dette skyldes litt tidspress. På side 75 derimot kan man finne disse formlene hvis så skulle komme opp på eksamen.

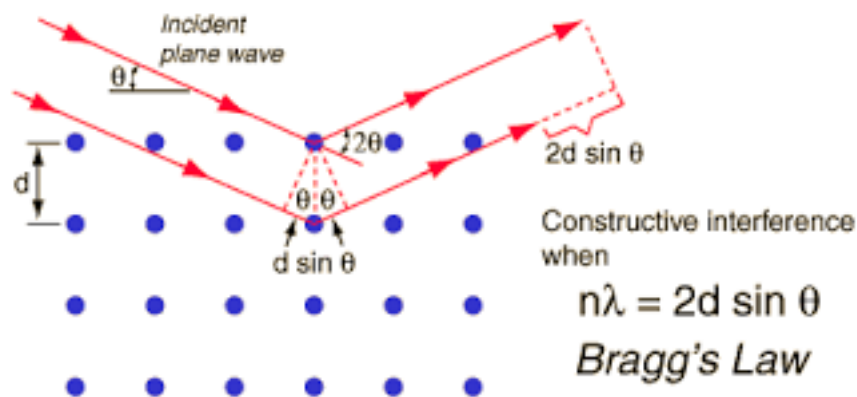


Figure 10: viser Braggs lov og hvordan det fungerer i praksis

4 Spørsmål 3: Wave diffraction in crystals; Laue condition; Bragg planes; Brillouin zones (BZ) – introduce with x-rays and shortly generalize to other relevant waves.

på norsk lyder oppgaveteksten som følgende: Bølgediffraksjon i krystaller; Laue betingelser, Bragg planer; Brillouin soner (BZ) - introduser med x-rays og hurtig generaliser til andre relevante bølger

X-rays eller røntgenstråler på norsk har en bølgelengde på mellom 0,01-10 nm. De er fotoner og er viktige i materialkarakteriseringen fordi bølgelengdene til xrays er sammenlignbare med størrelsen til atomer. De energetiske røntgenstrålene penetrerer dypt inn til materialet og gir informasjon om bulkstrukturen. X-rays blir produsert i x-ray tuber og materialet som brukes i disse tubene er Cu/Mo. Når x-rays går inn i materialet, så kolliderer de med elektroner i atomet. Noen av disse x-rays skifter retning, men forandrer ikke bølgelengde eller energi. Dette kalles for elastisk scattering. Disse er x-ray fotonene vi måler i diffraksjonsspredningseksperimenter.

Ellers nevnes det i Kittel at man studerer krystallstruktur gjennom en diffraksjon av fotoner, nøytroner og elektroner. De har alle hvert sitt forskjellige instrument og metode. Før jeg går nærmere inn på Braggs lov har vi fra boken Solid State Physics skrevet av Ibach og Luth dette: Formen og dimensjonene til enhetscellen kan bli dedusert fra posisjonen til Bragg refleksjoner; innholdet til enhetscellen derimot må bli bestemt av intensiteten til refleksjonene.

For å forstå Braggs lov bedre: forestill deg at de reflekterte bølgene er reflekterte spekulært av de parallelle planer atomer i krystallet. I spekulære (speil-lignende) refleksjoner er vinkelen av innsidens lik vinkelen til refleksjon. Man finner diffraksjonsstrålen når det er konstruktiv interferens mellom dem (ved konstruktiv interferens adderes bølger til hverandre). I tillegg så referes det her til figure 10 som viser Bragg planer og hvordan det fungerer i praksis.

$$2d * \sin(\theta) = n * \lambda \quad (19)$$

Det ovenfor er Braggs lov. Her er parallellgitter planene avstanden d ifra hverandre. Radiasjonen er insidert i papirplanet. "Path difference" for stråler reflektert fra nærtliggende plan er $2d\sin(\theta)$, hvor θ er målt fra planet. Konstruktiv interferens oppstår når $n * \lambda$ som da gir formelen for Braggs lov (19). Kun tilfredsstilt når $\lambda \leq 2d$. Braggs lov er en konsekvens av periodisiteten til gitteret.

Så går vi over til det om reciprocal gitter.

Ekvivalente påstander om diffraksjonsbetingelser	Formlene
Braggs lov	$n * \lambda = 2d\sin(\theta)$
Laue betingelse	$\Delta * \vec{k} = \vec{G}$
Diffraksjonsbetingelse I	$2\vec{k} * \vec{G} = G^2$
Diffraksjonsbetingelse II	$\vec{k} * (\vec{G}/2) = (G/2)^2$

Table 1: Ekvivalente påstander om diffraksjonsbetingelser

Vi har allerede translasjonen, $T = u_1a_1 + u_2a_2 + u_3a_3$. I tillegg har vi at elektron number densiteten $n(r)$ er gitt av den periodiske funksjonen r med perioden a_1, a_2, a_3 . Det gir:

$$n(r + T) = n(r) \quad (20)$$

Denne periodisiteten gir grobunn for Fourier-analyse. Så ser vi på Fourier-koeffisienten for utvidelsen. Faktoren $\frac{2\pi}{a}$ sørger for at $n(x)$ har perioden a . Det gir da:

$$n(x + a) = n_0 + \sum [C_p \cos(2\pi * p * x/a) + S_p \sin(2\pi * px/a)] = n(x) \quad (21)$$

Vi sier da at $2\pi p/a$ er et punkt i det reciprocale gitteret eller Fourier-rommet til krystallet. De reciprocale gitterpunktene gir oss de tillatte verdiene i Fourier-serien. Det må være i perioden til krystallet. Man kan også skrive (21) som:

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi * px/a) \quad (22)$$

som også blir til

$$2\text{Re}(n_p \cos(\varphi)) - 2\text{Im}(n_p \sin(\varphi)) \quad (23)$$

Når vi skal utvide Fourier-analysen til tre dimensjoner, så finner vi et vektorsett G som gir:

$$n(r) = \sum_G n_G \exp(iG * r) \quad (24)$$

Vi skal så finne vektorene til G . Først lager vi aksevektorene b_1, b_2, b_3 til det reciprocale gitter. Her er det slik at a_1, a_2, a_3 er de primitive vektorene til krystallgitter, mens b_1, b_2, b_3 er de primitive vektorer til det reciprocale gitter.

$$b_1 = 2\pi * (a_2 a_3) / (a_1 * a_2 a_3), b_2 = 2\pi * (a_1 a_3) / (a_1 * a_2 a_3), b_3 = 2\pi * (a_1 a_2) / (a_1 * a_2 a_3) \quad (25)$$

Så ser vi på G . $G = v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3$ hvor v_1, v_2, v_3 er integre. Vektor G er den reciprocale gittervektor.

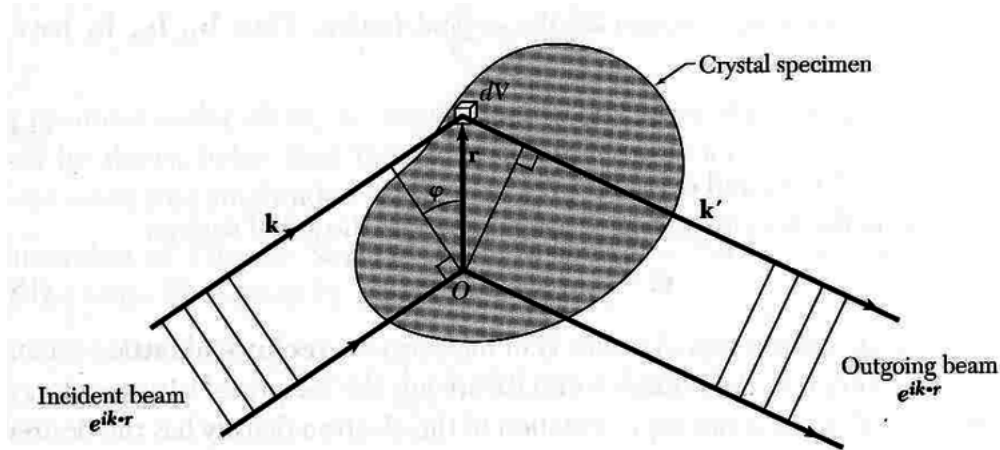


Figure 11: Her ser vi en forskjell i vekstfaktor og hvordan bølgevektoren kommer inn og går ut av et krystallmateriale, k inngående vektor og k' utgående

Tilslutt får vi da:

$$n(r + T) = \sum_G n_G * \exp(iG \cdot r) * \exp(iG \cdot T) \quad (26)$$

Ethvert krystallstruktur har to gitter assosiert med det: krystallgitteret og det reciproale gitter. Et diffraksjonsmønster er et kart over det reciprocal gitteret til krystallet.

På figur 11 ser vi at forskjellen i fasefaktorer er $\exp[i(k - k') \cdot r]$. Bølgevektorene til innkommende og utgående stråler er k og k' . Amplituden til de såredte elektromagnetiske bølger kalles for spredningsamplituden og er gitt av:

$$k + \Delta k = k' \quad (27)$$

hvor Δk er forandringen i bølgevektor.

$$\Delta k = G \quad (28)$$

Når Δk er lik en spesiell reciprocal gittervektor. Det gjør at vi kan sette (27) inn i (28) og få en diffraksjonsbetingelse:

$$2k \cdot G + G^2 = 0 \quad (29)$$

Hvis G er en reciprocal gittervektor, så er også $-G$. Det gir da:

$$2k \cdot G = G^2 \quad (30)$$

‘Laue-ligninger’ er også en form for diffraksjonsbetingelse. De kan reduseres til Braggs lov. Vi tar skalarproduktet av både

Δk og G . Vi får $a_1 \cdot \Delta k = 2\pi v_1$, $a_2 \cdot \Delta k = 2\pi v_2$ og tilslutt da $a_3 \cdot \Delta k = 2\pi v_3$.

Disse ligningene forteller oss at Δk ligger på en viss kjegle i retning av a_1 for den første av Laue-ligningene. Den andre forteller oss at Δk ligger på en viss kjegle i retning av a_2 . Den tredje forteller

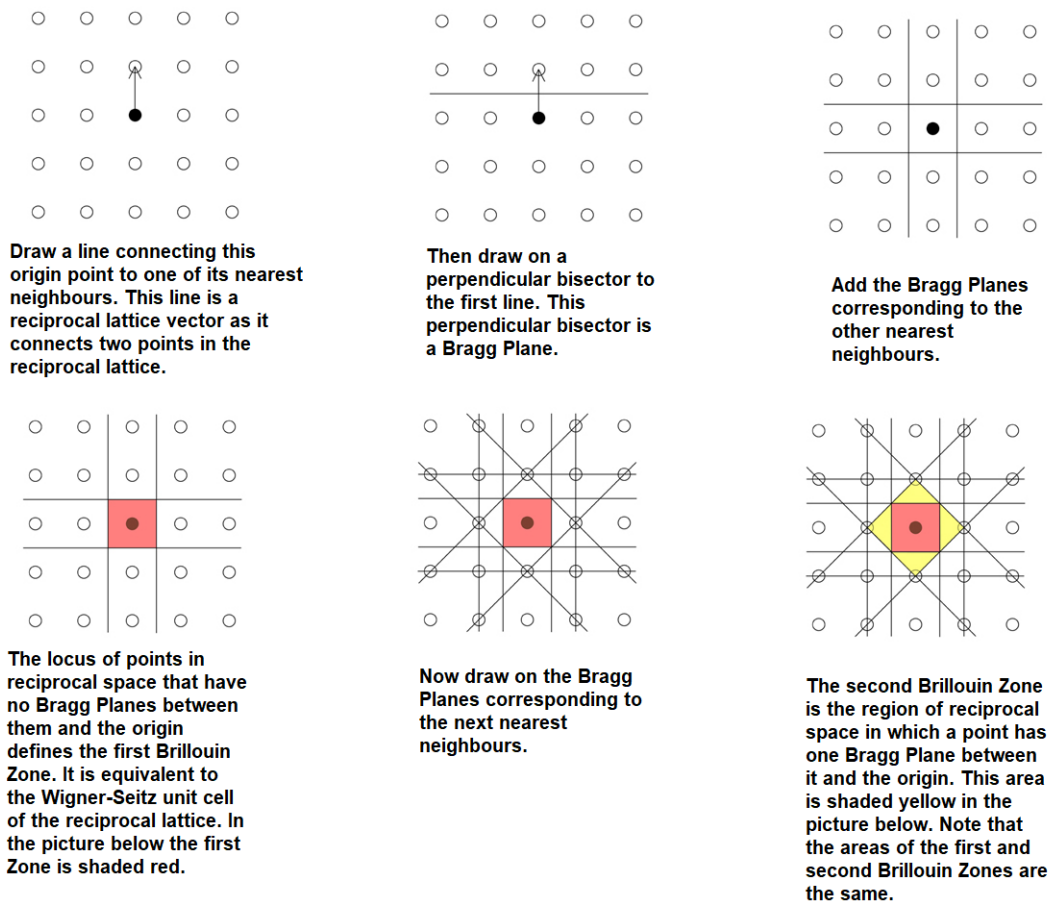


Figure 12: I denne figuren fra Cambridge University ser vi hvordan en Brillouin-sone kan lages, det gjelder da både den første og andre Brillouin-sonene. Utover det blir det svært komplekst

det samme i retning a_3 . Derfor ved refleksjon Δk er det slik at det ligger ved et felles kryssningspunkt for alle tre kjegler.

Bragg-plan er et plan i det reciproale rom som krysser den reciproale gittervektor k ved riktige vinkler. En formel for et slikt plan er:

$$d * (k - k') = 2 * \pi * m \quad (31)$$

Brillouinsoner: En Brillouin-sone er definert som en Wigner-Seitz primitiv celle i det reciproale gitter (se tilbake til Wigner-Seitz for å se hva det er og hvordan man eventuelt lager det). Det ble også gjort i Modul II. Etter figur 12 ser man at kan bli ganske komplisert etter de to første Brillouin-sonene. Det kommer muligens ikke på eksamen, men ha det i minne likevel. Den sentrale cellen i det reciproale gitter er spesielt viktig og kalles for den første Brillouin-sone. Det kan bli omtalt slik (på engelsk og tatt fra Kittel): The first Brillouin-zone is the smallest volume entirely enclosed by planes that are the perpendicular bisectors of the reciprocal lattice vectors down from

the origin.

Så kommer formel for å finne SC, BCC og FCC Brillouin-soner. Jeg skriver dem bare ned i tabellformler.

SC

Translasjonsvektor: $a_1 = a\hat{x}$, $a_2 = a\hat{y}$, $a_3 = a\hat{z}$

Reciprocalgitter: $b_1 = (2\pi/a)\hat{x}$, $b_2 = (2\pi/a)\hat{y}$, $b_3 = (2\pi/a)\hat{z}$.

Volum til celle: $a_1 \times a_2 \times a_3$

Grensene til de 6 første Brillouinsoner: $\pm \frac{1}{2}b_1 = \pm(\pi/a)\hat{x}$, $\pm \frac{1}{2}b_2 = \pm(\pi/a)\hat{y}$, $\pm \frac{1}{2}b_3 = \pm(\pi/a)\hat{z}$.

De 6 plan som binder en kube av kant $= 2\pi/a$ og volum $= (2\pi/a)^3$ er den første Brillouinsonen til SC krystallgitter.

BCC

Translasjonsvektor: $a_1 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, $a_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$, $a_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$

Volum: $\frac{1}{2}a^3$

Reciprocalvektor: $b_1 = (2\pi/a)(\hat{y} + \hat{z})$, $b_2 = (2\pi/a)(\hat{x} + \hat{z})$

Grensene til Brillouinsonene: $(2\pi/a)(\pm\hat{y} \pm \hat{z})$; $(2\pi/a)(\pm\hat{x} \pm \hat{z})$; $(2\pi/a)(\pm\hat{x} \pm \hat{y})$

FCC

Translasjonsvektor: $a_1 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$, $a_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$, $a_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$

Volum: $\frac{1}{4}a^3$

Reciprocal gittervektor: $b_1 = (2\pi/a)(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, $b_2 = (2\pi/a)(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$ og $b_3 = (2\pi/a)(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$

Brillouinsonene: $(2\pi/a)(\pm\hat{x} \pm \hat{y} \pm \hat{z})$

5 Spørsmål 4: Atomic vibrations in infinite periodic lattices: dispersion relations - $w(k)$ and group velocity $v_g(k)$ in the first Brillouin zone of 1D crystal: acoustic and optical branches of $w(k)$

på norsk blir det: atomiske vibrasjoner i uendelige periodiske gitter - dispersjonsrelasjonen - $w(k)$ og gruppevelocitet - v_g i den første Brillouinsonen til 1D krystall; akustikk og optiske bransjer av $w(k)$

I fysikken er et fonon en kvantisert, kollektiv eksitasjon, som regel i et krystall eller annet fast medium. Eksitasjonen er relatert til vibrasjoner av nodene i krystallen og beskriver mange viktige egenskaper til faste stoff, slik som termisk- og elektrisk ledningsevne. Eksitasjon med lange bølgelengder gir opphav til lyd i mediet, derav fonon, som er avledet av "stemme" på engelsk. Begrepet fonon er analogt til foton, som er en lyseksitasjon.

Vi skal i denne oppgaven se på elastiske vibrasjoner til et krystall for både krystaller med monatomisk basis og de med diatomisk basis. Dette må gjøres for å klare å svare på hele spørsmålet. De matematiske løsningene er enklest i [100], [110] og [111] propagasjonsretningene i kubiske krystaller. Når en bølge propagerer langs en av disse retningene, så beveger hele plan av atomer seg i fase med forflytningen enten i parallell eller perpendikulær retning til bølgevektor. *us* gir forflytningen av








	Elektron	-----
	Foton	Elektromagnetisk bølge
	Phonon	Elastisk bølge
	Plasmon	Kollektiv elektron bølge
	Magnon	Magnetiseringsbølge
	Polaron	Elektron + elastisk deformasjon
	Eksiton	Polarisasjonsbølge

Figure 13: Viser de forskjellige former for bølger som finnes, fonon er altså en av dem og blir karakterisert som en elastisk bølge

plan s fra dets likevektposisjon. For hver bølgevektor er det tre løsninger for u_s : en longitudinal polarisasjon og to transverse polarisasjon.

Vi har at bevegelsen til et atom i et plan er:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \quad (32)$$

hvor M = massen til atomet og C = elastisk konstant.

Vi antar at $u_n = Ae^{[i(kX_n - wt)]}$, hvor $X_n = na$ og får:

$$M(-w^2)exp(ikna) = -C[2exp(ikna) - exp(ik(n+1)a) - exp(ik(n-1)a)] \quad (33)$$

som fører til dispersjonsrelasjonen:

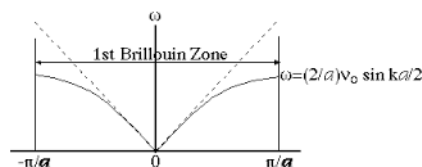
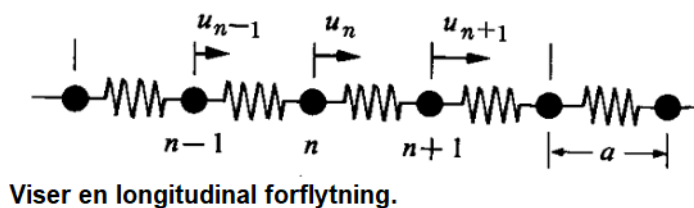
$$w(k) = w_m |\sin(ka/2)|, w_m = 2\sqrt{C/M} \quad (34)$$

Bølgene med bølgetall k og $k + 2\pi/a$ beskriver den samme atomiske forflytningen. Derfor kan vi begrense k til inne i den første Brillouinsonen $[-\pi/a, \pi/a]$. Dette kommer av ligningen nedenfor:

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \frac{uexp([i(s+1)ka])}{uexp([iska])} = uexp(ika) \quad (35)$$

Hvis vi har et punkt utenfor den første sonen, så kan vi ved å finne en integer n som den er multiplisert med og derav beskrive den innen den første sonen. Det betyr da at ettersom $2\pi/a$ er en reciprocal gittervektor, så er også $2\pi n/a$ det.

Ved grensene $K_{max} = \pm\pi/a$ til Brillouinsonen, så representerer ikke løsningen $u_s = uexp(isKa)$ ikke en bølge som beveger seg, men heller en såkalt "standing wave". Grunnen til at det er en standing wave er at alternerte atomer oscillerer i motsatte faser, fordi $u_s = \pm 1$ i henhold til om s er en jevn eller odde integer. Bølgen beveger seg altså verken til høyre eller venstre. Det minner



En dispersjonskurve med grenser i $-\pi/a$ og π/a

Figure 14: viser både en longitudinal forflytning og en dispersjonskurve med grenser i $-\pi/a$ og π/a

om Braggs refleksjon av x-rays, hvor hvis betingelsen er oppfylt blir det også en standing wave. Den kritiske verdien som er funnet her tilfredstiller Braggs betingelser i (19).

Så ser vi på gruppevelisiteten/hastigheten. Gruppehastigheten til en bølge er hastigheten hvor den totale formen til en bølges amplitude (modulasjonen til en bølge) propagerer gjennom rom. Denne forklaringen er litt tungvint, så vi bruker heller en annen. Fra SNL.no har vi at gruppehastighet er den hastighet en bølgegruppe forplanter seg med. I stoff der bølgehastigheten er forskjellig for forskjellige bølgelengder, er gruppehastigheten forskjellig fra fasehastigheten, som er den hastigheten en enkelt bølge forplanter seg med.

Gruppehastighet er gitt av $v_g = dw/dK$. Dette er hastigheten til energipropagasjon i medium. For vår formel blir det:

$$v_g = (Ca^2/M)^{0.5} \cos\left(\frac{1}{2}Ka\right) \quad (36)$$

Denne er 0 ved kanten $K = \pi/a$. Der er den en standing wave, så det er ganske naturlig å tenke seg.

Nå skal vi se på det siste aspektet i spørsmålet; nemlig akustiske og optiske grener av $w(k)$. Denne "problemstillingen" oppstår først når man begynner å behandle diatomiske basis (som for eksempel NaCl). Vi har longitudinale (LA) og transverse (TA) akustiske moduser, smat LO og TO optiske moduser.

Hvis det er p antall atomer i den primitive cellen, så er det $3p$ grener til dispersjonsrelasjonen: 3 akustiske og $3p-3$ optiske grener. Derfor har for eksempel germanium med to atomer i en primitiv celle 6 grener = en LA, en LO, to TA og to TO. Dette kommer av at man med p atomer i den primitive celle og N antall primitive celler har pN atomer. Med tre frihetsgrader for hvert atom, får man $3pN$ grader av frihet for krystallet. Det gir da antallet tillate K -verdier i en enkelt gren.

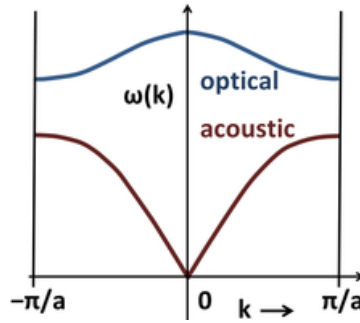


Figure 15: viser akustiske og optiske moduser innenfor en Brillouin-sone

Vi ser så på en kubisk krystall hvor atomer med masse M_1 ligger på et sett av planer og atomer med masse M_2 flettet inn mellom de fra det første settet (se figur 9 på side 97 i Kittel). a er den distansen som blir gjentatt i gitteret. Vi følger en symmetri hvor et enkelt plan inneholder kun et enkelt ion, som i [111] for NaCl. Bevegelsesligningene for hvert plan er gitt av (de interagerer kun med nærmeste nabo-plan og elastiske konstantene er identiske mellom alle par til nærmeste-nabo plan):

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \quad (37)$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \quad (38)$$

Vi ser etter en løsning i form av en bevegende bølge, nå med forskjellige amplituder u og v på alternerende plan. Det gir:

$$u_s = u \exp(isKa) \exp(i\omega t), v_s = v \exp(isKa) \exp(-i\omega t) \quad (39)$$

Vi setter (39) i (37) og (38). Det gir oss da (se side 98 og 99):

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0 \quad (40)$$

Vi løser dette med de begrensende tilfellene $Ka \ll 1$ og $Ka = \pm\pi$ ved sonegrensen. De to røttene blir da:

$$\omega^2 = 2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad (41)$$

$$\omega^2 = \frac{\frac{1}{2}C}{M_1 + M_2} * K^2 * s^2 \quad (42)$$

Her er (41) rota til den optiske gren, mens (42) er rota til den akustiske gren.

6 Spørsmål 5: Quantization of atomic vibrations = restrictions on k-numbers as a result of boundary conditions; phonon density of states (DOS) as a function of k and w for 1D, 2D, and 3D.

Oppgaveteksten på norsk blir: Kvantisering av atomiske vibrasjoner - begrensninger på k-tall som et resultat av grensebetingelser: fonontetthet til tilstander (DOS) som en funksjon av k og w for 1D, 2D og 3D

Energien til en gittervibrasjon er kvantisert. Kvanteenergien er kalt for fonon, som i en analogi til fotonet til en elektromagnetisk bølge.

Varmekapasiteten er definert som $C_V = (\frac{\partial U}{\partial T})_V$, hvor U er energien og T er temperaturen. Bidraget fra fononer til varmekapasiteten til et krystall er kalt for gitter varmekapasitet, og blir kalt for C_{lat} .

$$U_{lat} = \sum_K \sum_p U_{K,p} = \sum_K \sum_p (n_{K,p}) \hbar \omega_{K,p} \quad (43)$$

hvor $\langle n_{K,p} \rangle$ er termal likevektsoccupancy av fononer av bølgevektor K og polarisasjon p. $\langle n_{K,p} \rangle$ er gitt av:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp(\frac{\hbar \omega}{\tau})} \quad (44)$$

med $\tau = k_B T$.

$$\langle n \rangle = \frac{x}{1 - x} \quad (45)$$

Her er (45) en omskriving av (44) og brukes ofte i utregninger.

Så ser vi på restriksjoner på k-tall som følge av grensebetingelser. Vi har en 1D-linje av lengde L med N+1 partikler med separasjon a. Partiklene s=0 og s=N er faste endepunkter. Hvert normale vibrasjonelle modus av polarisasjon p har formen til en stående bølge hvor u_s til partikkel s:

$$u_s = u(0) \exp(-i \omega_{K,p} t) \sin s K a \quad (46)$$

Som en følge av fixed-end grensebetingelse er K begrenset til: (Se figur 16 nedenfor)

Det gir da disse tillatte verdiene for K.

$K = \pi/L, 2\pi/L, 3\pi/L, \dots, \frac{(N-1)\pi}{L}$
Løsninger $K=\pi/L$ har $u_s \propto \sin(s\pi a/L)$.

Og forsvinner for s=0 og s=N som krevd. Hver tillatte verdi av K er assosiert med en stående bølge. For 1D er det en modus for hvert intervall $\Delta K = \pi/L$ slik at antall modus per enhets-cellerekkevidde av K er L/π for $K \leq \pi/a$ og 0 for $K > \pi/a$.

Phonon density of states (DOS) er gitt av:

$$D_1(w)dw = \frac{L}{\pi} * \frac{dw}{\frac{dw}{dK}} \quad (47)$$

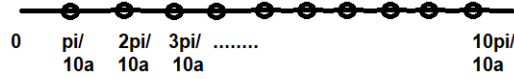


Figure 16: Vi har grensebetingelsene $sKa = 0$ for $s=10$ ved å velge $k = \pi/10a, 2\pi/10a, \dots$ hvor $10a$ er lengde L til linjen. Punktene er ikke atomer, men heller tillatte verdier av K .

hvor $\frac{dw}{dK}$ er gruppehastigheten (eller gruppevelisiteten som det heter på engelsk).

Fonon density of states for 3D, da er det slik at vi har:

$$K_x, K_y, K_z = 0; \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L, \dots, N\pi/L.$$

Derfor er det en tillat verdi av K per volum $(2\pi/L)^3$ i K -rom, eller:

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{8\pi^3} \quad (48)$$

tillatte verdier av K per enhetsvolum av K rom, for hver polarisasjon og for hvert gren.

-Total antall modus med bølgevektor mindre enn K er $(L/2\pi)^3$ multiplisert med volumet til en sfære av radius K . Derfor

$$N = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{4\pi K^3}{3}\right) \quad (49)$$

for hver polarisasjonstype. Density of states per polarisasjon er da:

$$D(w) = \frac{dN}{dw} = \left(\frac{VK^2}{2\pi^2}\right) \left(\frac{dK}{dw}\right) \quad (50)$$

Se i modul II for hvordan man skal finne $DOS(k)$, i tillegg til eksempler på $DOS(w)$. Dette er ikke helt riktig format for å gjøre det her.

7 Spørsmål 6: Lattice heat capacity; analysis of different models; implications of the system dimensionality.

Oppgavetekst på norsk: Gitter varmekapasitet: analyse av forskjellige modeller, samt implikasjonen til system dimensjonalitet

Med varmekapasitet mener vi varmekapasitet ved konstant volum fremfor konstant trykk og som er definert som $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$. Bidraget fra fononene til varmekapasiteten til et krystall kalles for gitter (lattice altså) varmekapasitet og er benevnt med C_{lat} .

Vi har at fononer er basert på bølgevektoren og når vi skal finne energien, så tar vi et integral

over K for å få med alle fononer. Vi antar at krystallet har $D_p(w)$ dw antall moduser over en gitt polarisasjon p i frekvensrekkevidden $w + dw$, det gir med en derivasjon som for varmekapasiteten denne formelen for gitter varmekapasitet:

$$C_{lat} = k_B \sum_p \int dw D_p(w) \frac{x^2 \exp x}{(\exp x - 1)^2} \quad (51)$$

Her er hovedpoenget at vi må finne $D(w)$, antall moduser per enhetsfrekvensrekkevidde. $D(w)$ = density of states.

Så skal vi se på de forskjellige modellene for gitter varmekapasitet som: Debye og Einstein, samt Dulong-Petint. I sammenligningen av dem referer vi til mitt svar i Modul II som kommer på slutten av dette kapitlet, men vi går igjennom aspekter av dem her for sikkerhets skyld.

Vi går igjennom Debye-modellen først: I Debye tilnærmingen er hastigheten til lyd ansett som konstant for hver polarisasjonstype, som ved klassisk elastisk kontinuum. Dispersjonen er skrevet som:

$$w = vK \quad (52)$$

med v = konstant hastighet til lyd.

DOS blir da:

$$D(w) = \frac{Vw^2}{w\pi^2v^3} \quad (53)$$

Hvis det er N primitive celler i spesimentet, så blir totalt antall akustiske fonon moduser oppgitt som N . En cut-off frekvens w_D er gitt som:

$$w_D^3 = \frac{6\pi^2v^3N}{V} \quad (54)$$

For bølgevektoren blir det:

$$K_D = \frac{w_D}{V} = \left(\frac{6\pi^2N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (55)$$

Vi får en Debye-temperatur θ ut i fra w_D definert som:

$$\theta = \frac{\hbar v}{k_B} * \left(\frac{g\pi^2N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (56)$$

slik at total fonon energi blir:

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{\exp(x) - 1} dx \quad (57)$$

Varmekapasiteten blir da:

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 * \exp(x)}{(\exp(x) - 1)^2} \quad (58)$$

Debye-varmekapasitet blir ved $T \gg \theta$ lik den klassiske (Petit-Dulong) verdien på $3Nk_B$. Så ser vi på dimensjonalitet. Ved veldig lav temperatur lar vi den øvre grensen gå til uendelig. Dette gir:

$$6 \sum_1^\infty \frac{1}{s^4} = \frac{\pi^4}{15} \quad (59)$$

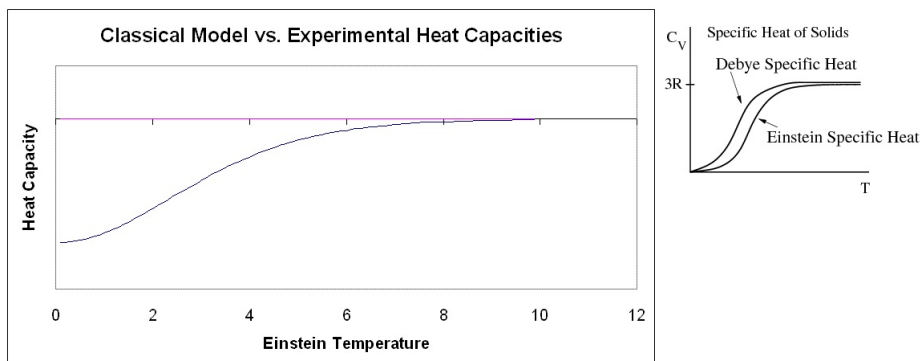


Figure 17: I figuren ser vi en sammenligning mellom Einstein-modellen og den klassiske modellen til venstre, mens den til høyre er en sammenligning mellom Debye-modellen og Einstein

Dette gir da $C_V = 234 Nk_B(\frac{T}{\theta})^3$ som er Debye T^3 -approksimasjonen. Ved lave nok temperaturer er den ganske god. Her oppfordres det til å se på figur 10, kapittel 5 i Kittel som forklarer dette ganske bra. Einstein-modellen:

Einstein DOS er $D(w) = N\delta(w - w_0)$ hvor delta-funksjonen er sentrert ved w_0 . Den termale energien:

$$U = N \langle n \rangle \hbar w = \frac{N \hbar w}{\exp(\hbar w / \tau) - 1} \quad (60)$$

Varmekapasiteten blir da:

$$C_V = Nk_B \left(\frac{\hbar w}{\tau} \right)^2 \frac{\exp(\hbar w / \tau)}{(\exp(\hbar w / \tau) - 1)^2} \quad (61)$$

I 3-dimensjoner er N erstattet av $3N$ ettersom det er 3 moduser per oscillatorer. Høy temperatur gir $3Nk_B$.

Så skal vi sammenligne og evaluere de tre modellene: Dulong-Petit, Debye og Einstein. Det er tatt direkte fra Modul II og det du skrev der.

Dulong-Petit gir en konstant verdi for energien og formelen er $C_V = 3Nk_B$. Dette blir i pensum omtalt som Dulong-Petit verdien. Selve atomene fungerer som klassiske oscillatorer. Modellen forutser C_V ganske bra for solider med relativt simple krystallstrukturer ved høye temperaturer. For romtemperatur (RT), så feiler modellen for lette atomer som er sterkt bundet til hverandre. Mens ved veldig lave temperaturer (kryogenisk = -150 grader Celsius) feiler den for alle substanser. Dette skyldes at ved det stadiet har kvantiseringen av energi større og større effekt.

Einstein innførte kvante-oppførsel og viste hvorfor C_V blir temperaturavhengig ved lave temperaturer. Samtidig stemte hans modell med Dulong-Petit ved høye temperaturer og som derav var kontinuerlig. Man har N identiske oscillatorer av frekvens W og alle atomer i krystallen sees på som oscillatorer. De vibrerer uavhengig av hverandre og har ingen relasjon mellom atomene. En siste faktor er at i Einstein-modellen synker C_V for fort ved lave temperaturer. Men modellen viser i hvert fall korrekte trender med temperaturen.

Debye-modellen gir korrekt T^3 avhengighet av C_V ved lave temperaturer. Den ser på krystallen som en enhet der vibrasjonene går gjennom krystallen som bølger med kvantiserte k -vektorer

på grunn av krystallgrensene. Oscillatorene har forskjellige kvantiseringer (i motsetning til Einstein-modellen som påpekt ovenfor) og gir derav forskjellige energi-spektre. Som en følge av dette får man en korrekt modell for C_V .

8 Spørsmål 7: Lattice thermal conductivity; analysis at “low” and “high” temperatures; implications of the system dimensionality.

På norsk blir det: Gitter termisk konduktivitet: analyser ved ”lave” og ”høye” temperaturer: implikasjonene til system dimensjonalitet

Fra den kinetiske teorien til gasser har vi følgende uttrykk for termal konduktivitet:

$$K = \frac{1}{3} * C v l \quad (62)$$

hvor C = varmekapasitet per volum, v = gjennomsnittlig partikkelhastighet og l = mean free path of a particle between collisions. Debye gjorde om til å gjelde for gitter med disse verdiene: C = varmekapasitet for fononer, v = fononhastighet, l = fonon mean free path.

Fonon mean free path, l , er hovedsakelig bestemt av to prosesser: geometrisk scattering og scattering av andre fononer. Ved harmoniske krefter mellom atomer ville det ikke ha vært scattering av kollisjoner med andre fononer, men slik er det ikke i realiteten. Med ikke-harmoniske gitter-interaksjoner er det en kobling mellom forskjellige fononer som begrenser verdeen av mean free path. De nøyaktige tilstandene av det ikke-harmoniske system fungerer ikke lenger som fononer.

Teorien om effekten av ikke-harmoniske kobling på termal resistivitet forutser at l er proporsjonal til $1/T$ ved høye temperaturer. Dette ser vi fra at ved høye temperaturer er det totale antall eksiterte fononer proporsjonal til T . Kollisjonsfrekvensen til en gitt fonon bør være proporsjonal til antall fononer det kan kollidere med, derav $l \propto 1/T$.

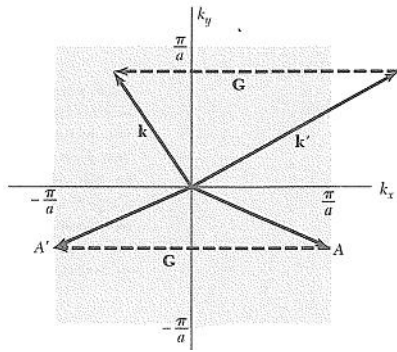
For å ha termal konduktivitet, er en definisjon at man må ha en mekanisme hvor fordelingen av fononer kan bli brakt til likevekt. Uten det kan vi ikke si at fononer ved en ende er ved likevekt med temperatur T_2 og de på den andre enden med temperatur T_1 . Fononkollisjoner med krystallgrenser vil ikke alene gi termal likevekt. Dette skyldes at disse kollisjonene forandrer ikke energiene til de individuelle fononer. Samtidig gir ikke tre-fonon kollisjonsprosessen:

$$K_1 + K_2 = K_3 \quad (63)$$

heller likevekt ettersom det totale momentum for fonongassen ikke blir forandret som en følge av kollisjonen. Vi sier at fononmomentet:

$$J = \sum_K n_K \hbar K \quad (64)$$

er konserververt fordi $K_3 - K_2 - K_1 = 0$. n_K = antall fononer med bølgevektor k .



Reduced Zone Scheme

\mathbf{k}' is outside 1st BZ.

$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$ is inside.

Figure 18: viser redusert zone skjematikk

Derimot er det slik at den tre-fonon prosessen som sørger for termal resistivitet er på formen:

$$K_1 + K_2 = K_3 + G \quad (65)$$

hvor G er en reciprocal gittervektor. Disse prosessene kalles med G involvert kalles for Umklapp prosesser. For fononer er det slik de eneste meningsfulle fonon K ligger i den første Brillouin-sonen, så enhver K som er lenger og produsert, må bli brakt tilbake til den første sonen ved en tillegg G . En kollisjon av to fononer med negativ K , kan med en umklapp prosess ($G \neq 0$) bli gjort til et fonon med positiv K . Kollisjoner med $G = 0$ blir kalt for normale prosesser. Her kan jeg legge til at normale prosesser blir gitt benevnelsen N , mens umklapp-prosesser blir gitt benevnelsen U .

Ved høye temperaturer $T > \theta$ vil alle fononmoduser eksiteres fordi $k_B T > \hbar \omega_{maks}$. En betraktelig andel av fonon-kollisjoner være Umklapp på grunn av den høye attendant momentum forandringen i kollisjonen. Her kan vi estimere den termiske resistiviteten uten å gjøre forskjell på N og U og vi har en termal resisitivitet $\propto T$ ved høye temperaturer.

Ved lave temperaturer så vil antallet passende fononer med høy energi $= \frac{1}{2} k_B \theta$ varieres som $\exp(\frac{-\theta}{2T})$. Hvis fononene har lav K vil det være umulig å få dem utenfor den første sonen.

Som avslutning kan vi si dette: Fonon mean free path er mean free path for Umklapp kollisjoner mellom fononene og ikke for alle kollisjoner mellom fononene.

9 Spørsmål 8: Free electron gas (FEG) or Drude model for electrons in solids - success and limitations.

Oppgaven på norsk: Fri elektron gass (FEG) eller Drude modellen for elektroner i solider - suksess og begrensninger

I dette spørsmålet skal vi forklare fri elektron modellen for gass og forsøke å forstå hvorfor en teori som tok hensyn til kvante-effekten (FEFG) var nødvendig for å øke vår forståelse av faststoff-fysikk. Vi skal også forklare FEG sine suksesser og begrensninger. Til slutt skal jeg forsøke å se på

deriveringen av Wiedeman-Franz loven og sammenligne den teoretiske verdien med tabellverdi for FEFG.

I henhold til fri elektron modellen, så blir valenselektroner til et atom til konduksjonselektroner og beveger seg fritt gjennom volumet til metallet. Det er forskjellige meninger om hva som var gjennombruddet for kondensert stoffers fysikk, men en viktig start var oppdagelsen av elektronet i 1897. Like etter (i 1900) brukte P. Drude dette nye konseptet til å postulere en teori elektronisk konduktivitet. Drude funderte på hvorfor resistiviteten til forskjellige materialer varierer fra $10^{-8}\Omega m$ (Ag) til $10^{20}\Omega m$ (polystyren).

Drude arbeidet før kvantemekanikken ble utviklet, så han begynte med en klassisk modell, mer spesifikt:

- (i) positive ionekjerner inne i en elektrongass son følger Maxwell-Boltzmanns statistikk
- (ii) følger den kinetiske teori til gasser - elektroner er i en form av fritt elektrongass (FEG), slik at individuelle elektroner beveger seg i rette linjer og gjør kollisjoner kun med ionekjeder; det betyr altså at elektron-elektron interaksjoner er neglisjert.
- (iii) Elektroner mister energi gained fra det elektriske feltet i kollisjoner og mean free path er tilnærmet den interatomiske distansen.

Drude (eller FEG) modellen klarte på en susceptibel måte å forklare Ohms lov og Wiedeman-Franz loven, men klarte for eksempel ikke å forklare elektron varmekapasitet og den magnetiske susceptibiliteten til konduksjonselektroner. Disse kommer ikke av mangler på elektron-modellen, men heller som en følge av den klassiske Maxwell fordelingsfunksjonen. I tillegg er det et annet problem med den klassiske modellen: det er at ut i fra eksperimenter har man sett at elektroner kan reise gjennom mange interatomiske distanser uten å kollidere.

Så skal vi forklare Ohms lov med FEG. Hastighet til elektroner i FEG med RT:

$$\frac{1}{2}mv_t^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad (66)$$

$$v_t = \sqrt{\left(\frac{3k_B T}{m}\right)} \quad (67)$$

Vi anvender et elektrisk felt. Bevegelsesligningen er:

$$\frac{dv}{dt}m_e = -eE \quad (68)$$

som skal integreres og gir:

$$v(t) = \frac{-eEt}{m_e} \quad (69)$$

Så har vi at τ er gjennomsnittlig tid mellom kollisjoner.

$$\tilde{v} = \frac{-eE\tau}{m_e} \quad (70)$$

Current density: $j = n\tilde{v}(-e)$ og med (69) får vi:

$$j = \frac{ne^2\tau}{m_e} * E \quad (71)$$

som også er Ohms lov.

Jeg skal så derivere Wiedeman-Franz loven: Koeffisienten til loven er: $L = \frac{K}{\sigma T}$ basert på FEG. Fra kapittel 5 i Kittel har vi at for klassiske ideelle gasser er den termale konduktiviteten gitt av:

$$K = \frac{1}{3} v_t^2 \tau C_V \quad (72)$$

Vi har allerede at $v_t = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$. Vi finner Ohms lov som før igjen og får at en annen versjon av loven er: $j = \sigma E$. Som omgjøres til $\sigma = \frac{j}{E}$ for å få:

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m_e} \quad (73)$$

(72) og (73) settes så inn i $L = \frac{K}{\sigma T}$. Dette fører til og vi husker at fra klassisk gasslov har vi at $C_V = \frac{3}{2} n k_B$:

$$L = \frac{\frac{1}{3} v_t^2 \tau C_V}{\frac{ne^2 \tau}{m_e}} \quad (74)$$

Dette gir da

$$L = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e^2} \right) * T \quad (75)$$

Ved å sette inn verdier blir svaret $L = 1,11 * 10^{-8} \text{ watt} - ohm / K^2$. Som er rundt halvparten av FEFG-verdien fra pensum. Les om enigheten av dette senere.

10 Spørsmål 9: Free electron Fermi gas (FEFG); energy dispersion $E(k)$; DOS in the ground state in 3D.

På norsk: Frie elektron Fermi gass (FEFG): Energidisperjson $E(k)$; DOS i ground tilstand i 3D

Vi har at et konduksjonselektron blir spredt (scattered) bare noen ganger (med ikke særlig hyppighet altså) av andre konduksjonselektroner. Dette skyldes Paulis eksklusjonsprinsipp. Derfor trenger vi Free electron Fermi gas (FEFG) teorien. Vi har den gamle Schrödinger-ligningen for å ta hensyn til kvante-effekten. Elektronet har masse m og begrenset til lengde L . Bølgefunksjonen $\psi_n(x)$ er en løsning på SL:

$$H\psi_n = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = \varepsilon_n \psi_n \quad (76)$$

hvor ε_n er energien til elektroner i orbital. Orbital brukes om en løsning av bølgefunksjonen for et system med kun et elektron. Etter litt mellomregning i Kittel kommer vi fram til:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \quad (77)$$

Husk at mye av kvantemekanikken kommer av eksperimenter og å tilpasse ligninger til eksperimentelle resultater.

n	m_s	Electron occupancy
1	\uparrow	1
1	\downarrow	1
2	\uparrow	1
2	\downarrow	1
3	\uparrow	1
3	\downarrow	1
4	\uparrow	0
4	\downarrow	0

Table 2: Med 6 elektroner ser vi hvordan skallene fylles opp av elektroner

I henhold til Paulis eksklusjonsprinsipp kan ikke to elektroner ha alle deres kvantetall like, noe som medfører at hvert orbital kan kun være okkupert av et elektron. I solider bruker vi kvantetallne n og m_s . n = ethvert positivt integer og m_s = magnetisk kvantetall som er $\pm\frac{1}{2}$ i henhold til spinorientasjon.

Hvis flere enn en orbital har samme energi, er det en degenerasjon. Fermi-energien, ε_F , er definert som energien til "the topmost filled level in the ground state", $n = 1$.

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_F \pi}{L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N \pi}{2L} \right)^2 \quad (78)$$

Så forsøker vi å finne energidispsjonen, $E(k)$. Vi har SL i 3 dimensjoner gitt av:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_n(r) = \varepsilon_k \psi_k(r) \quad (79)$$

Bølgefunksjonen som tilfredstiller fripartikkel SL og periodisitetsbetingelsen er av formen til en travelling plan bølge:

$$\psi_k(r) = \exp(ik \cdot r) \quad (80)$$

såfremt bølgevektor komponentene tilfredstiller $k_x = k_y = k_z = 0, \pm\frac{2\pi}{L}, \pm\frac{4\pi}{L}, \dots$

Vi setter (80) i (78) og får:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (81)$$

Vedrørende forholdet mellom bølgevektor og bølgelengde er dette gitt av $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Så finner vi DOS: Bølgevektorene på en Fermi-overflate har en størrelse: k_F . Det gir da

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} * k_F^2 \quad (82)$$

Dette fører til for volumelementet $(\frac{2\pi}{L})^3$ til k-rommet blir i sfæren av volum $\frac{4\pi k_F^3}{3}$

$$2 * \frac{4\pi * k_F/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} * k_F^3 = N \quad (83)$$

Det gir da for k_F (som benyttes senere).

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (84)$$

Vi setter så (84) og (82) sammen. Det gir:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (85)$$

som gir oss DOS:

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} * \varepsilon^{\frac{1}{2}} \quad (86)$$

som kan uttrykkes enklere i form av

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{3N}{2\varepsilon} \quad (87)$$

11 Spørsmål 10: FEFG DOS in quantum wells and quantum wires in the ground state.

På norsk lyder oppgaven: FEFG DOS i kvantebrønner og kvanteledninger i ground tilstand.

Motivasjonen er: interessante bærer rekombinasjoner i kvantebrønner som resulterer i fotoner med energi over båndgapet. Vanskelig å finne informasjon om dette i boken (skyldes sannsynligvis min mangel på hukommelse). Forelesningslidene ser ut til å bestå hovedsakelig av bilder. Men først (på engelsk) en forklaring av begrepet Density of States: The density of states function describes the number of states that are available in a system and is essential for determining the carrier concentrations and energy distributions of carriers within a semiconductor.

Så forklarer vi kort hva kvantebrønner og kvanteledninger er:

- Kvantebrenner (i 2D) er potensialbrønner som confines partikler i en dimensjon, og tvinger dem til å okkupere en planar region
- Kvanteledninger (i 1D) er en elektrisk ledende/konduktiv ledning, hvor kvante transporteffekter er viktige
- Kvanteprikker (0D) er halvlederkrystaller som holder elektroner, hull, eller elektronpar til 0 dimensjoner

Så skal jeg derivere hvordan man finner DOS for de to dimensjonene. Jeg begynner først med 2D. Vi ser på et sirkulært område med radius, $k = \sqrt{(k_x^2 + k_y^2)}$. (se figur nedenfor). Her har vi to friheter slik at vi kan benytte oss av 2-dimensjonaliteten. Den ene retningen av confinement (z-retningen) er ekskludert. Confinement betyr at den delen er kvantisert.

Arealet til sirkelen i k-rom er:

$$A_k = \pi * k^2 \quad (88)$$

en tilstand innen sirkelen er gitt ved:

$$A_{tilstand} = k_x * k_y \quad (89)$$

med $k_x = \frac{2\pi}{L_x}$, $k_y = \frac{2\pi}{L_y}$.

I tillegg har vi at $L_x = L = Na$ hvor N er antall enhetsceller og a er interatomisk distanse. Det gir

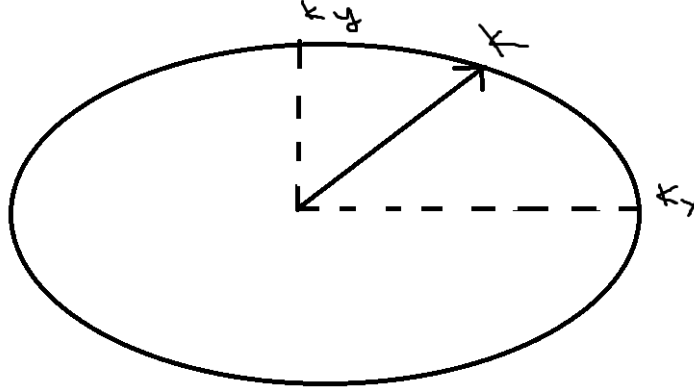


Figure 19: Sirkelen som viser to grader av friheter som brukes til å finne DOS for 2D

da:

$$A = \frac{4\pi^2}{L_x L_y} \quad (90)$$

Det totale antall tilstander er gitt av: $N_1 = \frac{A_k}{A_{tilstand}}$. Noe som gir: $N_1 = \frac{k^2}{4\pi} * L_x L_y$.

Hvis vi tar hensyn til spin degenerasjon, så er denne verdien multiplisert med 2. Dette fører da til følgende ligning:

$$N_2 = 2N_1 = \frac{k^2}{2\pi} * L_x L_y \quad (91)$$

Dette igjen gir at vi kan definere en arealtetthet

$$p = \frac{N_2}{L_x L_y} = \frac{k^2}{2\pi} = \frac{mE}{\pi\hbar^2} \quad (92)$$

Vi ønsker her da å finne $p_{energi} = \frac{\partial p}{\partial E}$ og får

$$p_{energi} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \quad (93)$$

Det følger også med en verdi for k_z . Dette er et sub-bånd og en uttrykker dette igjennom

$$p_{energi}(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \sum_{n_z} \Theta(E - E_{n_z}) \quad (94)$$

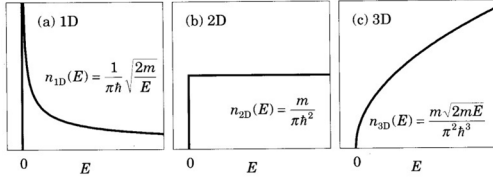
hvor n_z er kvantisert confinementenergi og er en Heaviside stegfunksjon (enten 0 eller 1) slik at vi får den velkjente stegfunksjonen.

Nå ser jeg på 1D (kvanteledninger:)

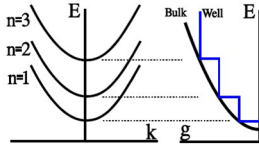
For en nanoledning, så ser vi på en symmetrisk linje rundt origo i k-rom med lengde $2k$:

$$L_k = 2k \quad (95)$$

DOS for low-dimensional FEFG



DOS in quantum wells



Density of states per unit volume and energy for a 3-D semiconductor (blue curve), a 10 nm quantum well with infinite barriers (red curve) and a 10 nm by 10 nm quantum wire with infinite barriers (green curve).

DOS in nanowires and quantum dots

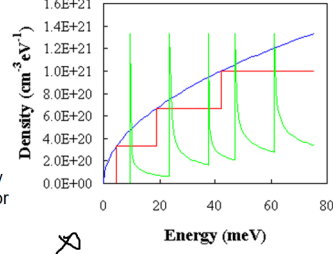


Figure 20: viser de tre dimensjonene og hvordan grafene deres er

Den assosierte bredde okkupert av en gitt tilstand er:

$$L_{tilstand} = k \quad (96)$$

hvor k kan være k_x, k_y eller k_z . 2 av retningene er confined. Vi bruker k_z som fri dimensjon.

$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z} \quad (97)$$

med $n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ og hvor $L_z)Na$.

$$N_1 = \frac{L_k}{L_{tilstand}} = \frac{k}{\pi} L_z \quad (98)$$

i Hvis spin degenerasjon også blir tatt med i betraktningen har vi:

$$N_2 = 2N_1 = \frac{2k}{\pi} L_z \quad (99)$$

Dette gir oss en tetthet med derivert inkludert på:

$$p_{energi} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{\sqrt{(E)}}} \quad (100)$$

Her kan vi også ta med stegfunksjonen for de to kvantiserte retningene, y og x , og få:

$$p_{energi}(E) = \frac{1}{\pi i} \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)} \sum_{n_x, n_y} \frac{1}{\sqrt{(E - E_{n_x, n_y})} * \Theta(E - E_{n_x, n_y})} \quad (101)$$

12 Spørsmål 11: FEFG at $T > 0$; heat capacity of FEFG; chemical potential (μ) versus Fermi energy (ε_F).

oversatt til norsk: FEFG ved $T > 0$: varmekapasitet til FEFG, kjemisk potensiale (μ) versus Fermi energi (ε_F)

I dette spørsmålet har vi to forskjellige aspekter som hver må besvares separat. Jeg begynner med varmekapasitet til FEFG, som var en tidlig problemstilling i fysikken. Klassisk statistisk mekanikk tilsa at en fri partikkel skulle ha en varmekapasitet på $\frac{3}{2}k_B$ med N atomer skulle den elektroniske ha vært på $\frac{3}{2}Nk_B$ med et valenselektron til elektrongassen. Men ved romtemperatur er det elektroniske bidraget som oftest 0,01 av denne antatte verdien. Fermi fant ut hva som var galt: "Spesifikk varme forsvinner ved absolutt 0, og ved lave temperaturer er den proporsjonal til absolutt temperatur".

Når vi varmer substratet fra det absolutte nullpunktet, så får ikke alle elektroner en gain på $k_B T$ i energi som forventet klassisk sett. Men kun de elektroner i orbitaler innefor en rekkevidde på $k_B T$ i forhold til Fermi nivået er eksitert termisk. De elektronene som kan bli eksitert: $\frac{NT}{T_F}$

$$U_{el} = \frac{NT}{T_F} k_B T \quad (102)$$

Elektronisk varmekapasitet for FEFG blir da:

$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = Nk_B \left(\frac{T}{T_F} \right) \quad (103)$$

Ved RT er den mindre enn den klassiske verdien med en faktor på 0,01 (se modul III?). Her er da $T_F = 5 * 10^4$.

Så finner vi et uttrykk som er kvalitativt og gjelder for $k_B T \ll \varepsilon_F$. Økningen $\Delta U = U(T) - U(0)$ i total energi av et system med N elektroner når varmet fra 0 til T:

$$\Delta U = \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) - \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon D(\varepsilon) \quad (104)$$

hvor $f(\varepsilon)$ er Fermi-Dirac funksjonen.

$$f(\varepsilon, T, \mu) = \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1\right]} \quad (105)$$

og $D(\varepsilon)$ er antallet orbitaler per enhetsenergi rekkevidde. Etter litt mellomregning får vi ΔU :

$$\Delta U = \int_{\varepsilon_F}^\infty d\varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_F) f(\varepsilon) D(\varepsilon) + \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon (\varepsilon_F - \varepsilon) [1 - f(\varepsilon)] D(\varepsilon) \quad (106)$$

Første del gir energi til å ta elektroner fra ε_F til orbitaler $\varepsilon > \varepsilon_F$ og andre del gir energi til å ta elektroner fra under ε_F til ε_F .

Varmekapasiteten blir funnet ved å derivere ΔU med hensyn til T igjen. Det gir da at kun $f(\varepsilon)$ er temperaturavhengig. Vi får:

$$C_{el} = \frac{dU}{dT} = \int_0^\infty d\varepsilon (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{df}{dT} * D(\varepsilon) \quad (107)$$

Man tilnærmer ofte Density of States. Vi foretar litt mellomregning og får:

$$C_{el} = \frac{1}{3} \pi^2 D(\varepsilon_F) k_B^2 T \quad (108)$$

Vi har allerede at

$$D(\varepsilon_F) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} = \frac{3N}{2k_B T_F} \quad (109)$$

fordi $k_B T_F = \varepsilon_F$. Som fører til vårt sluttresultat

$$C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{T}{T_F} \quad (110)$$

T_F er her en referansetemperatur.

Så skal vi se på den andre delen av oppgaven., nemlig forholdet mellom kjemisk potensiale (μ) og fermisk energi (ε_F). Jeg ser da på Fermi-Dirac distribusjonsfunksjonen. Vi bruker den til å se hva som skjer når temperaturen blir økt fra absolutt nullpunkt. Den kinetiske energien til elektron-gassen øker etterhvert som temperaturen øker: fordi noen energinivåer blir fylt og som var tomme ved nullpunktet og omvendt da.

Fermi-Dirac gir sannsynligheten at et orbital ved energi ε vil være okkupert. Det kjemiske potensialet μ er en funksjon av temperaturen. μ blir valgt slik at antall N blir korrekt. Ved absolutt nullpunkt er $\mu = \varepsilon_F$. Altså er de like. For alle temperaturer hvor $\varepsilon = \mu$, så er $f(\varepsilon) = \frac{1}{2}$. Her må vi referere til plottene vi utførte i Modul III og som jeg har lagt ved her. Det vil forklare alt bedre. Over nullpunktet er altså $\mu \neq \varepsilon_F$. De er kun like ved 0K.

13 Spørsmål 12: Transport properties of FEFG applying thermal, electric, and magnetic fields;

På norsk: Transportegenskapene til FEFG ved å anvende termiske, elektriske og magnetiske felt

Vi skal i denne oppgaven se på transportegenskapene til FEFG ved bruk av termal, elektriske og magnetiske felt. Vi begynner med det elektriske. Newtons andre bevegelseslov blir med et elektrisk felt E og magnetisk felt B :

$$F = m \frac{dV}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt} = -e(E + \frac{1}{c} v x B) \quad (111)$$

Det siste leddet i ligningen ovenfor er CGS fremfor SI. Hvis du skal omdanne til SI, sett c i det leddet lik 1. Vi integrerer så med $B = 0$ ettersom det ikke er noe magnetfelt tilstede fordi vi bare skal se på de elektriske egenskapene.

$$k(t) - k(0) = \frac{-eEt}{\hbar} \quad (112)$$

Hvis man så anvender kraften $F = -eE$ ved tiden $t=0$ til en elektrongass som fyller Fermisfæren sentrert på origo til k -rommet, så vil den ved tiden t forflyttes til:

$$\delta k = \frac{-eEt}{\hbar} \quad (113)$$

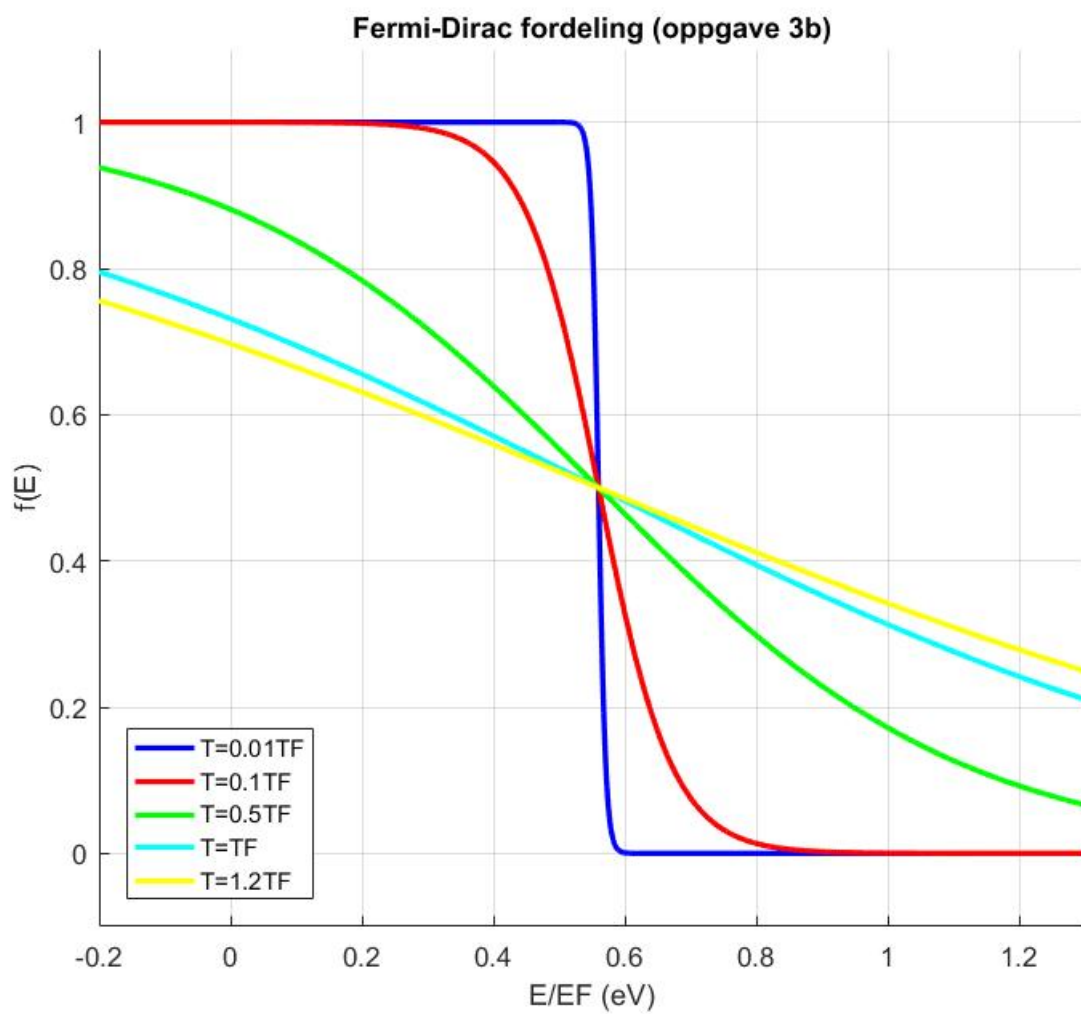


Figure 21: Viser forholdet $\varepsilon/\varepsilon_F$

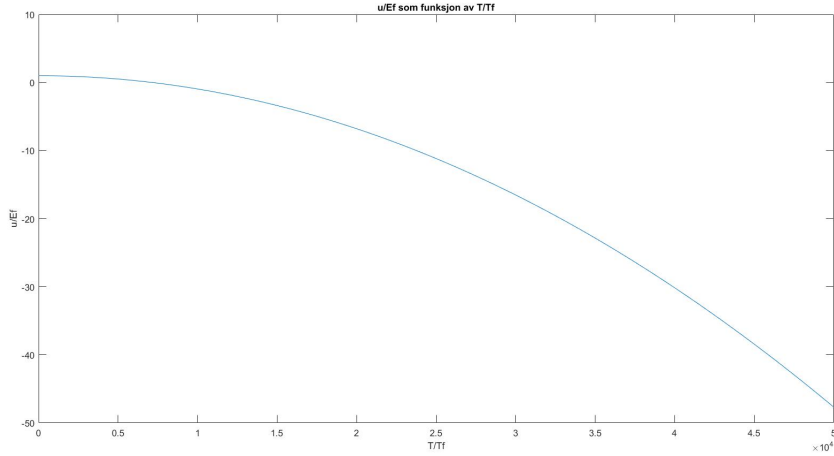


Figure 22: En annenegnelaget metode for Fermi-Dirac fordelingsfunksjonen

Hele Fermi-sfæren vil forflyttes fordi alle elektroner er forflyttet med samme δk . Som en følge av elektronkollisjoner med gitter urenheter og fononer, så kan den flyttede sfæren bli opprettholdt i steady state i et elektrisk felt. Kollisjonstiden $\tau = t$ og hastighet $v = \frac{\delta k}{m} = \frac{-eE\tau}{m}$ gir Ohms lov som er da (som vi husker fra før):

$$j = nqv = \frac{ne^2\tau E}{m} \quad (114)$$

Ligningen ovenfor er elektron strømtettheten. Den elektriske konduktiviteten σ er definert av $j = \sigma E$ som gir

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (115)$$

som igjen gir elektrisk resistivitet, fordi konduktivitet og resistivitet er reciprocale (eller omvendt proporsjonale til hverandre).

$$p = \frac{m}{ne^2\tau} \quad (116)$$

Når vi skal se på konduktiviteten til Fermi gass, så forventer vi at ladning transportert er proporsjonal til ladningstetthet ne . Faktoren $\frac{e}{m}$ trer inn fordi akselerasjonen i et elektrisk felt er proporsjonal til e og invers proporsjonal til m . Tiden τ beskriver den frie tiden hvor feltet fungerer på bærer.

Transport i magnetiske felt

Så ser vi på transport i magnetiske felt. Vi har bevegelsesligningen ved elektriske felt på:

$$\hbar\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)\delta k = F \quad (117)$$

Her er fri partikkel-leddet $(\frac{\hbar d}{dt})\delta k$ og effekten av kollisjoner, også for friksjoner, gitt av $\frac{\hbar\delta k}{\tau}$ hvor τ er altså kollisjonstiden.

Så legger vi det i et magnetisk felt B . Lorentzkraften på et elektron er:

$$F = -e(E + vxB) \quad (118)$$

Det gir da bevegelsesligningen

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v = -e(E + vxB) \quad (119)$$

Vi lar det statiske magnetiske feltet B ligge langs z-aksen. Det gir da

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)V_2 = -eE_z \quad (120)$$

Så går vi over til den relaterte Hall-effekten. Hall-effekten er en effekt som skyldes magnetiske krefters virkning på en elektrisk strøm. Hvis man plasserer en strømleder i et magnetfelt, så oppstår det en spenning (potensialforskjell) i lederen normalt på strømretningen og normalt på magnetfeltet.

$$E_y = -w_c \tau E_x = -\frac{eB\tau}{m} E_x \quad (121)$$

Hall-koeffisienten = den reciproale av bærerkonsentrasjonen og er gitt som:

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad (122)$$

Så litt om Pauli paramagnetisme siden det er på Andrej sine slides: Pauli paramagnetism

- Pauli paramagnetism is associated with the spin of the free electrons.
- Naively, one might expect that all the electrons align their magnetic moment with the external field. This would give rise to strong paramagnetism.
- This is not observed, a puzzling fact for a long time (along with the electrons' heat capacity!).

Det siste punktet vi skulle se på var termal transport: Den termale konduktiviteten til en Fermi gass er gitt av (basert på $K = \frac{1}{3}Cv_l$ og $\varepsilon_F = \frac{1}{2}mv_F^2$).

$$K_{el} = \frac{\pi^2}{3} \frac{nk_B^2 T}{mv_F^2} v_F l \quad (123)$$

$$= \frac{\pi^2 2nk_B^2 T \tau}{3m} \quad (124)$$

Så spør vi oss om elektroner eller fononer bærer den største delen av heat current i metallet. Svaret er: I rene metaller er det elektroniske bidraget dominerende ved alle temperaturer. I urene metaller er elektronets mean free path redusert av kollisjoner og bidraget fra fononer kan sammenlignes.

14 Spørsmål 13: Origin of the energy band structure in periodic lattices; “molecular orbital” and “electron wave diffraction” reasoning; electrons in a periodic potential.

Opprinnelse til energibånd strukturen i periodiske gitter: Moleklære ”orbitaler”, og ”elektronbølge diffraksjon” reasoning; elektroner i et periodisk potensiale

Alle solider inneholder elektroner. Det viktige spørsmålet for elektrisk lederevne er hvordan elektronene responderer til anvendt elektrisk felt. Elektronene i krystaller er arrangert i energibånd,

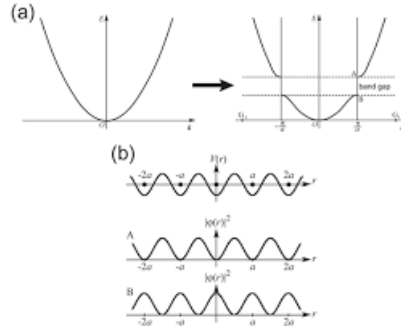


Figure 23: Vi har på bilden øverst en overgang fra fri elektron modell til nesten fri elektron modell. Vi ser der det ikke er noen elektroner og som omtales som båndgap

separert av regioner i energi hvor ingen bølgelignende elektron-orbitaler eksisterer. Disse regionene blir kalt for båndgap. Båndgap resulterer fra interaksjonen av konduksjonselektronbølger med ionekjerner til krystaller.

Krystallet oppfører seg som en isolator hvis de tillatte energibåndene er enten fylt opp eller tomme, fordi da kan ikke elektroner bevege seg i et elektrisk felt. Vi må altså ha delvis fylte bånd. Istedenfor den frie elektron modellen., bruker vi noe som heter nesten frie elektronmodell. På figuren nedenfor ser vi forskjellen på disse to modellene.

Vi ser der at det første tillatte energibåndet er i Brillouinsonen. Vi har at:

$$k = \pm \frac{1}{2}G = \pm n \frac{\pi}{a} \quad (125)$$

De andre tillatte energibåndene forekommer for andre verdier av n . Bølgefunksjonen ved $k = \pm \frac{\pi}{a}$ er ikke reisende (travelling waves) som $\exp(\pm \frac{\pi}{a})$ til frie elektroner, men består av like deler av bølger som går til venstre og høyre slik at man har stående bølger. Vi har da disse stående bølgene:

$$\psi(+) = \exp\left(\frac{i\pi x}{a}\right) + \exp\left(\frac{-i\pi x}{a}\right) \quad (126)$$

$$\psi(-) = \exp\left(\frac{i\pi x}{a}\right) - \exp\left(\frac{-i\pi x}{a}\right) \quad (127)$$

Så ser vi da på opprinnelsen til energigapet:

De to stående bølgene $\psi(+)$ og $\psi(-)$ samler opp elektroner ved forskjellige regioner. Det er av den grunn at de to bølgene har forskjellige verdier av potensial energier ved feltene til ionene i gitteret. Dette er opprinnelsen til energigapet.

Sannynlighetstettheten $p = \psi^* \psi = |\psi|^2$. For rent travelling waves:

$$p = \exp(-ikx)\exp(ikx) = 1 \quad (128)$$

slik at ladningstettheten er konstant. For stående bølger derimot $\psi(+)$ har vi:

$$p(+) = |\psi(+)|^2 \propto \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad (129)$$

Denne siste ligningen samler opp elektroner (negativ ladning) på positive ioner sentrert $x = 0, a, 2a, \dots$ hvor potensialenergien er lavest. På figur 3b side 166 i Kittel viser man elektronkonsentrasjonen for standing waves, $\psi(+)$, $\psi(-)$ og for travelling waves. Når man kalkulerer forventingsverdi til potensialenergien ved disse tre ladningsfordelingene, så er $p(+)$ lavere enn det til den stående bølge, mens $p(-)$ er høyere enn det til den stående bølge. Vi har et energigap på bredde E_g hvis energiene til $p(-)$ og $p(+)$ er forskjellige med størrelse E_g . Størrelsen på E_g blir gitt av:

$$E_g = \int_0^1 dx U(x) [|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2] \quad (130)$$

Så ser vi på elektroner i et periodisk potensiale. Gjør dette senere fordi du har for mye å gjøre. Det er fra side 169 og utover.

15 Spørsmål 14: Filling energy bands with electrons; k_F vs k_{BZ} in typical metals, e.g. Na; Fermi sphere; metal vs insulators; reasons for band overlaps;

På norsk: Å fylle energibånd med elektroner, k_F vs k_{BZ} i typiske metaller, som for eksempel Natrium (Na), Fermisfære, metaller vs isolatorer og grunner for bånd overlapp

Jeg vil først forklare Bloch-bølgen før jeg går inn på andre aspekter. Bloch-funksjonen er en type bølgefunksjon for en partikkel i periodisk-repeterende miljø, som oftest et elektron i et krystall. Det har formen:

$$\psi_k(r) = u_k(r) \exp(ik \cdot r) \quad (131)$$

hvor r er posisjon, ψ = Bloch bølge, u = periodisk funksjon med samme periodisitet som krystallet og k = bølgevektor, mens i = imaginær enhet.

Fermioverflaten er overflaten med konstant energi ε_F i k -rommet. Fermioverflaten separerer de tomme orbitalene fra de fylte orbitalene ved absolutt nullpunkt. De elektriske egenskapene til metallene er bestemt av volumet og formen til Fermi-overflaten.

Fri elektron Fermi overflater ble utviklet fra sfærer med radius k_F bestemt av valenselektron konsentrasjon. Konstruksjonene krever redusert og periodiske skjematikk. Vi svarer nå på k_F versus k_{BZ} . Her er begrepet redusert sone skjema viktig. Vi har sett figur av dette tidligere i teksten. Det er alltid mulig å velge en bølgevektorindeks k av enhver Bloch funksjon til å ligge inne i den første Brillouin-sonen. Vi har en Bloch-funksjon skrevet som $\psi_{k'}(r) = \exp(ik' \cdot r) * u_{k'}(r)$ med k' utenfor den første sonen. Da finner vi en reciprocal gittervektor G slik at $k = k' + G$ ligger inne i Brillouin og blir k_{BZ} .

Til og med for frie elektroner er det nyttig å arbeide i redusert sone skjema. Enhver energi $E_{k'}$ for k' som ligger utenfor den første sonen er lik E_k i den første sonen. Derfor trenger vi bare å løse E_k i den første Brillouin-sonen. Vedrørende periodisk sone kan vi repetere k_{BZ} periodisk gjennom hele bølgevektor. Dette kommer av:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{k'} + G \quad (132)$$

Vi forklarer de tre sonene:

- Utvide sone skjema: hvor forskjellige bånd er tatt fra forskjellige soner i bølgevektor

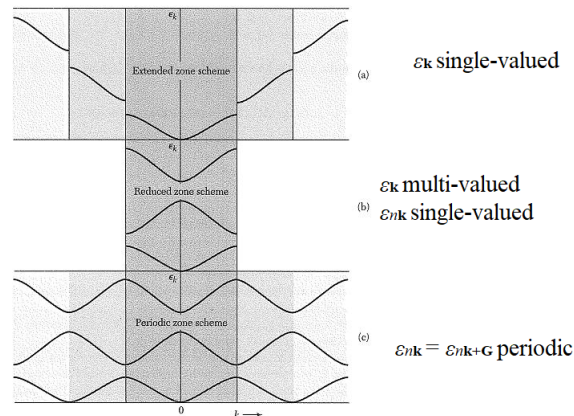


Figure 24: viser Periodisk, Redusert og Brillouin zone scheme

- Redusert sone skjema: hvor alle bånd er tatt fra første Brillouinsone
- Periodiske sone skjema: hvor alle bånd er tatt fra alle soner

Konstruksjon av Fermioverflater: ligningen til sonegrensen er:

$$2k * G + G^2 = 0 \quad (133)$$

Den første sonen er konstruert fra G_1 og de tre vektorene er ekvivalente til det i form av symmetri (reciprocale vektorer altså). Her oppfordres det til å se på figuren på side 227 før man tar eksamen. Disse reciprocale vektorene:

-

16 Spørsmål 15: Effective mass approximation and its application for understanding “hydrogen-like” impurities in semiconductors

Norske versjonen: Effektiv masse tilnærming og dets anvendelse for å forstå ”hydrogen-like” urenheter i halvledere

Jeg forklarer først hydrogen-like urenheter. Dette kommer av at man doper en halvleder som silisium med enten Bor eller Fosfor. Disse har henholdsvis 3 og 5 valenselektroner, mens Si har 4. Dette gir at man enten har et ytterste valenselektron eller valenshull til overs. Når vi vet at hydrogen bare har et valenselektron, får vi en lignende situasjon. Derfor kaller vi ”hydrogen-lik”.

Så går vi over til resten av oppgaven. Den formelle definisjonen av effektiv masse, m^* , er gitt av;

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \quad (134)$$

Når vi ser på energi-bølgevektor, $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ for frie elektroner ser en at k^2 bestemmer kurvaturen til ε versus k . Samtidig ser en også at $\frac{1}{m}$, den reciprocale massen, bestemmer kurvaturen. For

elektroner i et bånd kan det være regioner av uvanlig høy kurvatur nær båndgapet ved sonegrensen.

I halvleder båndbredde, som er omtrent som fri elektron energi, er på 20 eV. Dette mens båndgapet er av størrelse 0,2 til 2 eV. Derfor er den reciproale masse forsterket med en masse 10 til 100, mens den effektive massen er redusert til 0,1-0,01 av den frie elektron masse. Dette er verdier vi får i nærheten av båndgapet. Når vi går bort fra båndgapet blir kurvaturen og massene mer lik de til frie elektroner. Det gir disse formlene:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_c + \left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)k^2 \quad (135)$$

og

$$\frac{m_e}{m} = \frac{1}{\frac{2\lambda}{U} - 1} \quad (136)$$

m_e er den effektive massen til elektronet og k er bølgevektoren målt fra sonegrensen. m_e er ved kanten av det andre båndet. Et elektron nær toppen av det første båndet har energien.

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_v - \left(\frac{\hbar^2}{2m_h}\right)k^2 \quad (137)$$

og

$$\frac{m_h}{m} = \frac{1}{\frac{2\lambda}{U} + 1} \quad (138)$$

Med disse forskjellige verdiene til elektronet, så medfører det ikke en vektforskjell til krystallet eller noe sånt. Heller er ikke Newtons andre lov (altså $F = ma$) forandret på. Det den effektive massen derimot betyr er at et elektron i et periodisk potensiale er akselerert relativ til gitteret i et anvendt elektrisk eller magnetisk felt som om massen til elektroner er lik den effektive massen vi nå definerer.

Så ser vi på den fysiske tolkningen av effektiv masse:

Hvordan kan et elektron av masse m i et krystall respondere til anvendte felt som om det var av masse m^* ?

Nær bunnen av det lavere bånd er orbitalen representert av en plan bølge $\exp(ikx)$ med moment $\hbar k$. Bølgekomponenten $\exp[i(k-G)]$ med moment $\hbar(k-G)$ er liten og øker sakte etterhvert som k øker. I dette området er $m^* = m$. Økning i den reflekterte komponenten er momentoverføring til elektronet fra gitter. Nær grensene er den reflekterte komponenten ganske stor ettersom amplituden blir like stor som insidert bølge. Her er bølgene standing waves. $\hbar(-\frac{1}{2}G) = \hbar(\frac{1}{2}G)$. Et enkelt elektron i et energibånd kan ha en positiv eller negativ effektiv masse. Positiv effektiv masse = nær bunnen av et bånd fordi positiv effekt betyr at det har en oppadgående kurve. Negativ effektiv masse forekommer ved toppen av et bånd.

Så ser vi på effektiv masse i halvledere:

I faste stoffers fysikk er det to bånd: valensbåndet og konduksjonsbåndet som er båndene nærmest Fermi-nivået og bestemmer konduktiviteten til båndet. I halvledere er disse to separert av et båndgap. Et båndgap er, som allerede nevnt i teksten, en energirekkevidde i et solid hvor ingen elektrontilstander kan eksistere.

Så skriver vi ned noe fra wikipedia: In solids, the ability of electrons to act as charge carriers depends on the availability of vacant electronic states. This allows the electrons to increase their

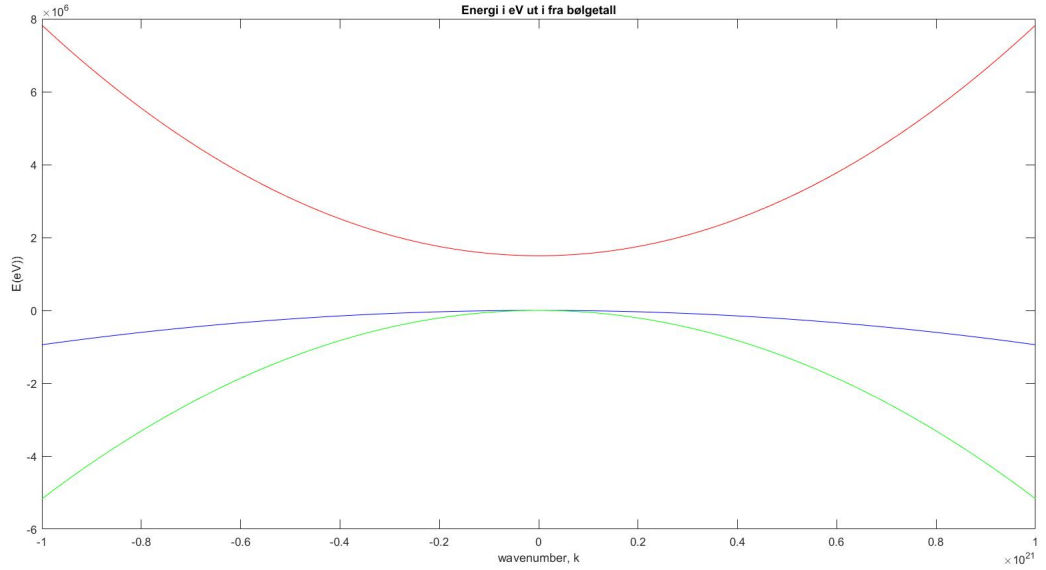


Figure 25: En egenlaget graf som viser hvordan tunge hull, lette hull og elektroner er i et plot. Jeg lagde dette plottet til modul IV, rødt = elektroner, blått = tungt hull og grønt = lett hull

energy (i.e., accelerate) when an electric field is applied. This condition is only satisfied in the conduction band, since the valence band is full in non-metals. As such, the electrical conductivity of a solid depends on its capability to flow electrons from the valence to the conduction band. Hence, in the case of a semimetal with an overlap region, the electrical conductivity is high. If there is a small band gap (E_g), then the flow of electrons from valence to conduction band is possible only if an external energy (thermal, etc.) is supplied; these groups with small E_g are called semiconductors. If the E_g is sufficiently high, then the flow of electrons from valence to conduction band becomes negligible under normal conditions; these groups are called insulators. There is some conductivity in semiconductors, however. This is due to thermal excitation—some of the electrons get enough energy to jump the band gap in one go. Once they are in the conduction band, they can conduct electricity, as can the hole they left behind in the valence band. The hole is an empty state that allows electrons in the valence band some degree of freedom.

I mange halvledere har det blitt mulig å bestemme de effektive massene til bærere i konduksjon og valensbåndene ved hjelp av en cyclotron. I direkte-gap halvledere har båndene form som i figure 25. Konduksjonsbåndene er sfæriske med masse m_0 og ligningen:

$$\varepsilon_C = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (139)$$

Mens valensbåndene er karakteristisk trefoldige nær kanten med tunge gull og lette hull degenerasjon i sentrum:

$$\varepsilon_v(hh) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \quad (140)$$

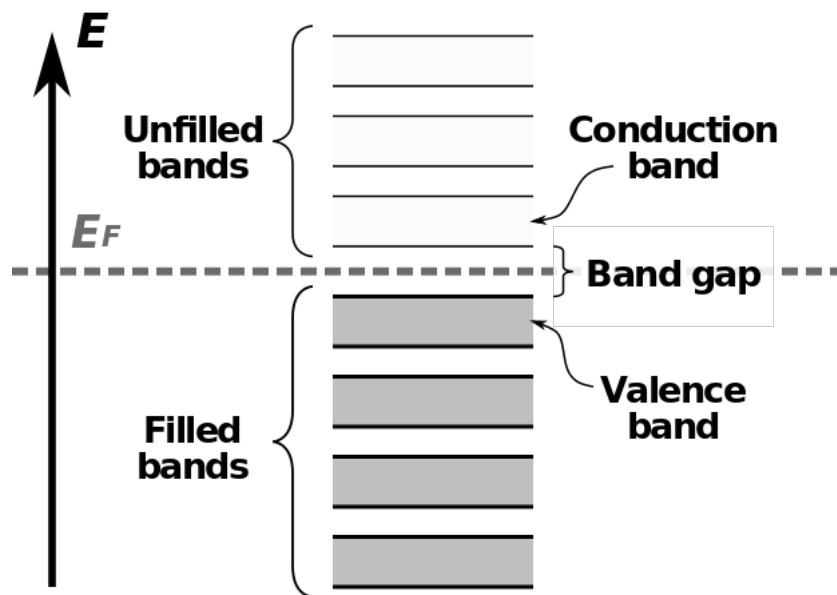


Figure 26: viser de valensbåndet og konduksjonsbåndet, samt båndgapet mellom dem i en halvleder

$$\varepsilon_v(lh) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \quad (141)$$

Så skal vi se på opprinnelsen til tunge og lette hull. Hull er elektroner som ellers mangler i ellers fylte bånd. Bølgevektoren til hullet er relatert til det manglende elektronet ved $k_n = -k_e$. En forklaring av begrepene er at valensbåndet ved gammapunktet (Γ) er tre-foldig generert. Ut ifra figuren ser vi at lette hull bånd har større stigningstall enn tungt hull bånd. Sistnevnte er flatere i sin form. Tunge hull er i tungt hull båndet, mens lette hull er i lette hull båndet. Tunge hull er tyngre enn lette hull, noe som medfører at tunge hull har en større effektiv masse enn lette hull. Derfor responderer de også forskjellig til anvendte elektriske felt. Lette hull responderer raskere.

17 Spørsmål 16: Electrons and holes in semiconductors; intrinsic and extrinsic carriers; variations in μ

På norsk: Elektroner og hull i halvledere: intrinsiske og ekstrinsiske bærere: variasjoner i μ

Med begrepet hull mener vi at det er elektronsites hvor det ikke er noen elektron, altså fravær av elektron. For begrepet intrinsiske mener vi bærere i et halvledermateriale som silisium hvor det ikke er eksterne urenheter som dopanter (enten frivillige eller ufrivillige). Med ekstrinsikk mener vi da at det er eksterne urenheter tilstede i halvlederen. Når vi skal kalkulere konsentrasjon har vi at det kjemiske potensiale μ gir antallet elektroner eksitert til konduksjonsbåndet ved en temperatur T . I halvlederfysikk er μ omtalt som Fermi-nivå. Vi antar at $\varepsilon - \mu \gg k_B T$ slik at Fermi-Dirac

distribusjonsfordelingen (FDD) blir:

$$f_e \approx \exp[(\mu - \varepsilon)/k_B T] \quad (142)$$

Konsentrasjonen av elektroner i konduksjonsbåndet er:

$$n = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[\left(\frac{\mu - \varepsilon}{k_B T}\right)\right] \quad (143)$$

Når vi kjenner til μ , så finner vi enkelt antallet elektroner. Det gir også at variasjonen i μ gir variasjoner i n .

For hull har vi som følgende:

$$f_h \approx \exp\left[\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)\right] \quad (144)$$

fordi $(\mu - \varepsilon) \gg k_B T$. Ellers har vi:

$$p = 2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[\left(\frac{E_c - \mu}{k_B T}\right)\right] \quad (145)$$

for hull i valensbånd konsentrasjon. Likevektsforholdet er gitt av np (elektroner og hull multiplisert med hverandre altså).

På grunn av forholdet np ser vi dette: Fotoner skaper elektron-hull ved rate $A(T)$, mens $B(T)np$ er raten til rekombinasjon. Det gir:

$$\frac{dn}{dt} = A(T) - B(T)np = \frac{dp}{dt} \quad (146)$$

Det gir at hvis vi introduserer en mengde n , så senkes p med tilsvarende. Dette kalles for "kompensasjon". I intrinsiske halvledere er $p = n$, fordi termal eksitasjon etterlater et hull (ved eksitasjon av elektroner altså).

$$n_i = p_i) 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e m_h)^{\frac{3}{4}} \left(\exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right) \right) \quad (147)$$

Vi kan også variere det kjemiske potensiale.

$$\mu = \frac{1}{2}E_g + \frac{3}{4}k_B T \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) \quad (148)$$

Hvis $m_e = m_h$, så $\mu = \frac{1}{2}E_g$ og ferminivået er i midten av det forbudte gap.

Urenheter: Vi har to former for urenheter: Donor og akseptor. Prosessen kalles for doping. Bor for eksempel øker konduktiviteten til Si betraktelig. Ioniseringsenergien til hydrogen-atomer er:

$$E_d = \frac{etm_e}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0)^2} \quad (149)$$

Et annet viktig poeng her er Bohr-radiusen. Bohr radius er den gjennomsnittlige radius til orbiten til et elektron rundt kjernen til et hydrogenatom ved dets ground state (eller sagt på en annen måte, den energi tilstanden med lavest energi). Verdien er $5,29 \cdot 10^{-11}$ meter. Det blir brukt fordi Bohr postulerte at elektroner orbitterte rundt en kjerne. Men det viste seg å være litt feil i henhold til

kvantefysikken. Det stemmer vel bare for hydrogenatomet.

I modul IV så vi på de tre stadiene ved doping av fosfor inn i et silisium-atom. Dette skal jeg da gjenfortelle her: Vi skal se på bærerkonsentrasjonen som funksjon av temperaturen i en P-dopet silisium. De tre grensene er: donor freezing out, ekstrinsikk og intrinsikk.

Utfrysing: $E_D \gg k_B T$

Her er ikke den termale energien nok til å ionisere alle donorer, men noen av dem er ionisert. Noe som betyr at deres elektroner er ekistert fra deres donor-nivåer E_D og inn til konduksjonsbåndet.

$$n \propto \exp\left(\frac{-E_D}{2k_B T}\right) \quad (150)$$

Mellomstadie temperatur (ekstrinsikk):

$$E_D \ll k_B T \ll E_g$$

Her er alle donorer ionisert, men den termale energien er ikke nok til å eksitere elektroner langs det intrinsikke båndgap:

$$n = \text{konstant} \quad (151)$$

Høy temperatur (intrinsikk):

$$E_g \ll k_B T$$

Den termale energien er nok til å eksitere elektroner langs båndgapet og til å produsere intrinsikke ladningsbærere. Det følger skalaringen:

$$n \propto \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right) \quad (152)$$

18 Spørsmål 17: p-n junctions; balance between diffusion and drift currents for electrons and holes; application of the forward or reverse external bias;

På norsk: p-n junctions: balanse mellom diffusjon og driftstrømmer for elektroner og hull; applikasjoner av forward og revers ekstern bias:

A p-n junction is a boundary or interface between two types of semiconductor material, p-type and n-type, inside a single crystal of semiconductor. The "p-side" (positive) contains an excess of holes, while the "n-side" (negative) contains an excess of electrons. The p-n junction is created by doping, and the interface may be less than 10^{-4} cm thick.

Holes concentrated on the p side would like to diffuse to fill the crystal uniformly, while electrons would like to diffuse from the n side. But diffusion will upset the local electrical neutrality of the system. This again leads to the fact that diffusion leaves behind excess of (-) ionized on the p side and likewise an excess of (+) ionized on the n side. This change double layer creates an electric field directed from n to p that inhibits diffusion and thereby maintains the separation of the two carrier type. Because of this double layer the electrostatic potential in the crystal takes a jump in passing through the region of the junction.

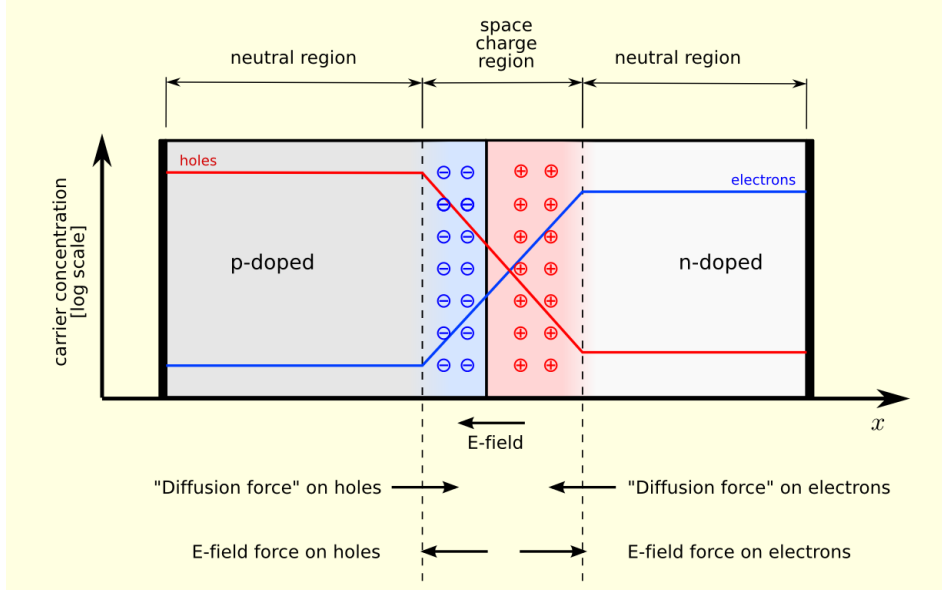


Figure 27: shows the pn-junction and the doping

In thermal equilibrium the chemical potential of each carrier type is everywhere constant in the crystal, even across the junction. This gives that for holes,

$$k_B T \ln p(r) + e\varphi(r) = \text{constant} \quad (153)$$

across the crystal, where p is the hole concentration and φ the electrostatic potential. Thus p is low where φ is high. For electrons we have that:

$$k_B T \ln n(r) - e\varphi(r) = \text{constant} \quad (154)$$

and n will be low where φ is low.

The total chemical potential is constant across the crystal since the concentration gradient cancels out the electrostatic potential. The net particle flow of each carrier type is zero. Despite this, some electrons are destined to diffuse from n to p and end their lives through a recombination with holes. In zero external applied field we have that:

$$J_{nr}(0) + J_{ng}(0) = 0 \quad (155)$$

In (155) J_{nr} is the recombination current, J_{ng} is the current of electrons generated thermally in the p region. If (155) was not the case the electrons would accumulate indefinitely on one side of the barrier.

Rectification: A p - n junction can act as a rectifier. A large current will flow if we apply a voltage across the junction in one direction, but if the voltage is in the opposite direction only a very small current will flow. If an alternating voltage is applied across the junction the current will flow chiefly in one direction - meaning that the junction has rectified the current.

I will first elaborate more on what reverse biasing and forward biasing is, before continuing on the syllabus. **Reverse biasing:** To reverse-bias the p-n junction, the p side is made more negative, making it "uphill" for electrons moving across the junction. **Forward biasing:** To forward bias the p-n junction, the p side is made more positive, so that it is "downhill" for electron motion across the junction. An electron can move across the junction and fill a vacancy or "hole" near the junction. It can then move from vacancy to vacancy leftward toward the positive terminal, which could be described as the hole moving right.

For the back voltage bias a negative voltage is applied to the p region and a positive voltage to the n region. This increases the potential difference between the regions, and leads to a situation where no electrons can climb the potential energy hill from the low side of the barrier to the high side. Recombination current is reduced by the Boltzmann factor:

$$J_{nr}(V_{back}) = J_{nr}(0) \exp\left(\frac{-e|V|}{k_B T}\right) \quad (156)$$

Boltzmanns factor controls the number of electrons with enough energy to get over the barrier.

When a forward voltage is applied, the recombination current increases because the potential energy barrier is lowered, thereby enabling more electrons to flow from the n side to the p side:

$$J_{nr}(forward) = J_{nr}(0) \exp\left(\frac{e|V|}{k_B T}\right) \quad (157)$$