

TMA4121

Forberedelser til eksamen

Peter Pham

2023-05-09

Contents

Oppgave 1	3
Oppgave 2	6
Oppgave 3	10
Oppgave 4	14
Oppgave 5	20
Oppgave 6	26

Oppgave 1

Ulike former for bølger

Det finnes to hovedtyper av bølger: mekaniske- og elektromagnetiske bølger. Mekaniske bølger er bølger som beveger seg gjennom et medium, for eksempel vannbølger eller lydbølger. Elektromagnetiske bølger er bølger som ikke trenger et medium for å bevege seg, for eksempel lys og radiobølger.

Bølger kan bevege seg transversale eller longitudinale.

Det kan være verdt å nevne at bølger har noder, som er punkter langs bølgen der amplituden er null, mens antinoder er det punkter på bølgen der amplituden er maksimal

Bølgelikningen i en dimensjon

Hvordan bølger beveger seg gjennom rom og tid kan beskrives med bølgelikningen gitt ved:

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Her er v bølgenes hastighet.

Harmoniske bølger

Bølger som oppfyller bølgelikningen og kan skrives som en sinus- eller cosinusfunksjon av formen:

$$u(x, t) = A \cdot \cos(kx - \omega t + \phi)$$

her er ϕ fasekonstanten, k er bølgetallet, ω vinkelfrekvensen og ϕ fasekonstanten som bestemmer posisjonen og fasen til bølgen ved $t = 0$.

Vi kan se her at formelen oppfyller bølgelikningen dersom bølgehastigheten $v = \frac{\omega}{k}$

Stående bølger

Når vi har to bølger med samme frekvens og amplitude som beveger seg i motsatt retning og overlapper hverandre så får vi en konstruktiv og destruktiv interferens. Dette resulterer i stående bølger, der nodene og antinodene nevnt tidligere er stasjonære punkter.

Bølgepakker

Bølgepakker er kombinasjoner av flere harmoniske bølger med ulike frekvenser og amplituder. De kan representeres matematisk som følger:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

Bølgepakker er lokalisert i rom og tid, noe som betyr at de har en begrenset utstrekning i både posisjon og tidsdomene.

Ved hjelp av Fourier-analyse kan vi finne spekteret av bølgepakker, dvs. frekvens- og amplitudemodulene til de harmoniske bølgene som utgjør bølgepakken. Fourier-transformasjonen er gitt ved:

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) e^{-ikx} dx$$

Schrödingerlikninga:

Schrödingerlikningen er den grunnleggende likningen for kvantemekanikk, og den beskriver hvordan en bølgefunksjon utvikler seg i tid. Den tidsavhengige Schrödingerlikningen er:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right] \Psi(x, t)$$

Her er $\Psi(x, t)$ bølgefunksjonen, \hbar er Plancks reduserte konstant, m er partikkelens masse, og $U(x, t)$ er det potensielle energifeltet.

For stasjonære tilstander, der potensialet ikke er tidsavhengig, kan vi skille ut tids- og romkomponentene i bølgefunksjonen og løse den tidsuavhengige Schrödingerlikningen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Bølgefunksjonen:

Bølgefunksjonen, vanligvis representert ved $\Psi(x, t)$, beskriver sannsynlighetsfordelingen til et kvantemekanisk system. Dens kvadrat, $|\Psi(x, t)|^2$, gir sannsynlighetstettheten for å finne partikkelen i en bestemt posisjon og tid.

For å sikre at den totale sannsynligheten for å finne partikkelen i hele rommet er lik 1, må bølgefunksjonen være normalisert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Egenfunksjoner og egenverdier er viktige konsepter i kvantemekanikken. Egenfunksjonene til en lineær operatør, som for eksempel Hamiltonoperatøren, er funksjonene som ikke endrer form når operatøren virker på dem, men blir multiplisert med en konstant, kalt egenverdi:

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

Heisenbergs uskarpleiksrelasjon:

Heisenbergs usikkerhetsrelasjon innebærer en begrensning i samtidig presis måling av komplementære variabler, som for eksempel posisjon (x) og impuls (p):

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Her er Δx og Δp usikkerhetene i målingene av posisjon og impuls, og \hbar er Plancks reduserte konstant.

Dobbeltpalteeksperimentet:

Dobbeltpalteeksperimentet viser at elektroner, fotoner og andre partikler kan opptre både som bølger og partikler, avhengig av omstendighetene.

Når partikler sendes gjennom to parallelle spalter og treffer en skjerm bak spaltene, vil de danne et interferensmønster som er karakteristisk for bølgefenomener. Dette indikerer at partiklene opptre som bølger underveis.

Oppgave 2

Kvantebrønn

Kvantebrønner er en modell som beskriver oppførselen til partikler som elektroner i potensialbrønner på kvantemekanisk nivå.

Uendeleg dyp kvantebrønn i 1D

En uendelig dyp kvantebrønn er en modell der et partikkel befinner seg i et potensial som er null innenfor brønnen og uendelig høyt utenfor. I én dimensjon kan vi betrakte partikkelen som beveger seg langs en x-akse, hvor brønnen strekker seg fra $x = 0$ til $x = a$.

I denne modellen kan vi løse Schrödinger-ligningen for å finne energinivåene og bølgefunksjonene til partikkelen. Siden potensialet er uendelig høyt utenfor brønnen, må bølgefunksjonen være null der. Innenfor brønnen må bølgefunksjonen og dens andrederiverte være kontinuerlig. Siden den ikke kan eksistere utenfor brønnen så impiserer dette også at bølgelikningen er normaliserbar.

Ved å løse Schrödinger-ligningen for denne situasjonen, finner vi at energinivåene er kvantiserte og gitt ved formelen:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2},$$

hvor n er en positiv heltall og a er brønnens bredde.

Bølgefunksjonene for bundne tilstander har formen:

$$\psi_n(X) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

der n er et positivt heltall, og x er posisjonen innenfor brønnen.

Bundne og spreide tilstander

Bundne tilstander er de tilstandene som er innesperret i brønnen, og de er karakterisert ved diskrete energinivåer og bølgefunksjoner som går mot null utenfor brønnen. Spreide tilstander, derimot, er ikke begrenset til brønnen og har kontinuerlige energinivåer. I en uendelig dyp kvantebrønn er det ingen spreide tilstander, siden partikkelen ikke kan eksistere utenfor brønnen.

Endeleg kvantebrønn

En endelig kvantebrønn er en modell der et partikkel befinner seg i et potensial som er null innenfor brønnen og en konstant, V_0 , utenfor brønnen. Akkurat som i det uendelig dype tilfellet, kan vi betrakte partikkelen som beveger seg langs en x -akse, hvor brønnen strekker seg fra $x = 0$ til $x = a$.

Sammenlignet med den uendelig dype kvantebrønnen, har endelige kvantebrønner noen viktige forskjeller i energinivåer og bølgefunksjoner. For det første er ikke energinivåene strengt kvantiserte. Det vil fortsatt være diskrete energinivåer for bundne tilstander, men det er også mulig for partikkelen å ha spreiende tilstander med energier større enn V_0 .

For å finne energinivåene og bølgefunksjonene i en endelig kvantebrønn, må vi løse Schrödinger-ligningen separat for de tre områdene: $x < 0$, $0 < x < L$ og $x > L$. Dette er mer komplisert enn for den uendelig dype brønnen, og løsningene vil involvere både trigonometriske funksjoner og eksponentialfunksjoner.

Innenfor brønnen ($0 < x < L$), vil bølgefunksjonen ha en form som likner den for den uendelig dype brønnen:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx),$$

der A og B er konstanter som bestemmes av randbetingelsene, og k er bølgetallet, gitt ved:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Utenfor brønnen ($x < 0$ og $x > L$) vil bølgefunksjonen ha en eksponentiell form, som representerer den eksponentielle avtagningen av sannsynligheten for å finne partikkelen utenfor brønnen:

$$\psi(x) = C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x},$$

der C og D er konstanter, og α er gitt ved:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Perturbasjonsteori

Dersom vi introduserer en liten endring i potensiale neddi brønnen så kan vi bruke perturbasjonsteori, som er en viktig metode for å løse det kvantemekaniske problemet.

Perturbasjonsteori innebærer å betrakte potensialet som en sum av en kjent del og en liten perturbasjon. Vi kan skrive potensialet som:

$$V(x) = V_0(x) + \lambda V_1(x),$$

der $V_0(x)$ er det kjente potensialet, for eksempel en endelig kvantebrønn, $V_1(x)$ er perturbasjonen, og λ er en liten parameter som angir styrken av perturbasjonen.

Vi antar at vi kjenner energinivåene og bølgefunksjonene for $V_0(x)$, og vi ønsker å finne hvordan de endres på grunn av perturbasjonen. Vi utvider energiene og bølgefunksjonene i serier i λ :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots,$$

$$\psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x) + \lambda \psi_n^{(1)}(x) + \lambda^2 \psi_n^{(2)}(x) + \dots,$$

der $E_n^{(0)}$ og $\psi_n^{(0)}(x)$ er energiene og bølgefunksjonene for $V_0(x)$, og $E_n^{(1)}$, $\psi_n^{(1)}(x)$, $E_n^{(2)}$, $\psi_n^{(2)}(x)$, osv. er korreksjoner på grunn av perturbasjonen.

Vi kan deretter sette disse utvidelsene inn i Schrödinger-ligningen og samle ledd med samme potens av λ . Dette gir oss et sett med hierarkiske ligninger som vi kan løse for å finne korreksjonene til energiene og bølgefunksjonene.

Tunnellering

Tunnellering oppstår når en partikkel har en ikke-null sannsynlighet for å befinne seg på den andre siden av en potensiell barriere, selv om dens energi er lavere enn barrierens høyde.

For å forstå tunnellering, kan vi tenke på en endelig kvantebrønn med en partikkel som har en energi E som er lavere enn høyden på den potensielle barrieren, V_0 . Bølgefunksjonen for partikkelen har en eksponentiell form utenfor brønnen, noe som betyr at det er en ikke-null sannsynlighet for å finne partikkelen utenfor brønnen, selv om dens energi er lavere enn barrierens høyde.

Sannsynligheten for tunnellering avhenger av både høyden og bredden på barrieren, samt energien til partikkelen. Generelt vil sannsynligheten for tunnellering avta eksponentielt med økende bredde og økende forskjell mellom barrierens høyde og partikkelens energi.

Målepostulatet

For å kunne koble den matematiske beskrivelsen av kvantetilstander til fysiske målinger og observasjoner kan vi ta i bruk prinsippet målepostulatet.

I tilfellet med en kvantebrønn, kan vi bruke målepostulatet til å forutsi sannsynlighetsfordelingen for å finne partikkelen på ulike steder innenfor og utenfor brønnen.

Målepostulatet består av to hovedprinsipper:

Forventningsverdien av en observabel, for eksempel posisjon eller energi, kan finnes ved å ta det indre produktet av bølgefunksjonen og den tilsvarende operatorrepresentasjonen av observabelen:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx,$$

der $\psi^*(x)$ er den komplekskonjugerte bølgefunksjonen, \hat{A} er operatoren som representerer observabelen, og $\psi(x)$ er bølgefunksjonen.

Når en måling utføres, vil systemet kollapse til en av egenfunksjonene til den målte observabelen med en sannsynlighet som er proporsjonal med absoluttkvadratet av bølgefunksjonen. Etter målingen vil systemet være i denne egenfunksjonen med en bestemt verdi av observabelen. Dette kan også likne veldig på dobbeltspalteeksperimentet.

Oppgave 3

Kvantebrønn i 3D (partikkel i boks)

I en 3D kvantebrønn har vi tre kvantetall, n_x , n_y , og n_z , som hver representerer partikkelens energinivå i de respektive retningene. Disse kvantetallene er positive heltall og kan ikke være null.

Energien til en partikkel i en 3D kvantebrønn kan uttrykkes som:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (1)$$

Når vi snakker om atomer, introduseres andre kvantetall for å beskrive elektronenes tilstander. De tre kvantetallene er hovedkvantetallet (n), banespinnkvantetallet (l) og det magnetiske kvantetallet (m). Disse kvantetallene spiller en viktig rolle i bestemmelsen av elektronenes energinivåer og deres romlige fordeling rundt atomkjernen.

Hovedkvantetallet n er et positivt heltall og bestemmer energinivået til elektronet. Større verdier av n representerer høyere energinivåer og større avstand fra kjernen.

Banespinnkvantetallet l er et heltall som varierer fra 0 til $n - 1$. Dette kvantetallet gir informasjon om formen på elektronets bane rundt kjernen og angis ofte med bokstavene s, p, d og f, som tilsvarer $l = 0, 1, 2$ og 3 .

Det magnetiske kvantetallet m er et heltall som varierer fra $-l$ til $+l$. Dette kvantetallet beskriver orienteringen av elektronets bane i forhold til et ytre magnetfelt og påvirker også energinivåene til elektronet når det er et magnetfelt til stede.

Degenerasjon

Degenerasjon refererer til fenomenet der flere tilstander i et kvantesystem har samme energi. Når et system har degenererte energinivåer, betyr det at det finnes flere tilstander som kan beskrive systemet uten å endre dets energi. Dette skjer ofte i kvantemekaniske systemer som kvantebrønner.

Elektronkonfigurasjon

Elektronkonfigurasjonen til et atom beskriver fordelingen av elektroner i atomets energinivåer og orbitaler. Det er avgjørende for å forstå atomers kjemiske egenskaper og hvordan de danner bindinger

med andre atomer. To viktige regler som hjelper oss med å bestemme elektronkonfigurasjonen er Madelungs regel og Hund's regel.

Madelungs regel gir en retningslinje for rekkefølgen av elektronfylling i orbitaler. Ifølge denne regelen fylles orbitaler med lavere energi først. Madelungs regel kan summeres opp ved hjelp av regelen $(n + l)$, der orbitaler med lavere $(n + l)$ -verdier fylles først. Hvis to orbitaler har samme $(n + l)$ -verdi, fylles orbitaler med lavere n -verdi først.

For eksempel fylles 1s-orbitaler før 2s-orbitaler fordi $(n + l)$ -verdien er lavere for 1s ($1+0$) enn for 2s ($2+0$). På samme måte fylles 2s før 2p, og 3s fylles før 3p og 3d. Denne regelen kan brukes til å finne elektronkonfigurasjonen til ethvert grunnstoff i det periodiske systemet.

Hund's regel gir retningslinjer for å bestemme elektronenes spinnkonfigurasjon når de fyller orbitaler med samme energi, som de degenererte orbitalene i p-, d- og f-blokkene. Hund's regel kan oppsummeres i tre hovedpunkter:

- Elektroner vil først fylle hvert orbital i en degenerert gruppe med samme spinn (enten opp eller ned) før de begynner å pare seg med motsatt spinn.
- Et atom vil ha maksimalt totalt spinnmoment (summen av elektronenes individuelle spinn) som er tillatt av Paulis eksklusjonsprinsipp for en gitt elektronkonfigurasjon.
- For atomer med mindre enn halvfyllt fylte orbitaler, vil den elektronkonfigurasjonen med det laveste totale orbitalmomentet være mest stabil.

Bindinger i faste stoffer

I faste stoffer holdes atomer sammen av forskjellige typer kjemiske bindinger. Disse bindingene bestemmer mange av stoffets egenskaper, som elektrisk ledningsevne. Det er fire hovedtyper av bindinger i faste stoffer: ioniske, kovalente, metalliske og van der Waals-bindinger.

Ioniske bindinger: Ioniske bindinger oppstår mellom metaller og ikke-metaller. De dannes når et metallatom overfører et eller flere elektroner til et ikke-metallatom, noe som resulterer i dannelsen av ioner med motsatte ladninger. Disse ionene tiltrekker hverandre på grunn av elektrostatisk tiltrekning og danner et ionisk fast stoff. Ioniske forbindelser har generelt høy smelte- og kokepunkt, og de leder elektrisitet når de er i smeltet eller oppløst tilstand.

Kovalente bindinger: Kovalente bindinger dannes mellom ikke-metallatomer. De oppstår når to eller flere atomer deler elektroner for å oppnå en stabil elektronkonfigurasjon. Kovalente bindinger kan være enkle, doble eller triple, avhengig av antall elektronpar som deles mellom atomene. Kovalente forbindelser kan danne molekulære faste stoffer, der molekylene holdes sammen av svake

van der Waals-bindinger, eller nettverksfaststoffer, der kovalente bindinger danner et tredimensjonalt nettverk.

Metalliske bindinger: Metalliske bindinger oppstår mellom metaller. De er resultatet av delingen av valenselektroner mellom metallatomer, som skaper et "elektronsjø" der elektronene kan bevege seg fritt. Denne frie bevegelsen av elektroner gir metallene deres karakteristiske egenskaper, som høy elektrisk og termisk ledningsevne, glans og duktilitet.

Van der Waals-bindinger: Van der Waals-bindinger er svake intermolekylære krefter som oppstår mellom molekyler eller atomer på grunn av midlertidige ladningsfordelinger. Disse kreftene inkluderer dipol-dipol-interaksjoner, dipol-induserte dipolinteraksjoner og London-dispersjonskrefter. Van der Waals-bindinger er svakere enn ioniske, kovalente og metalliske bindinger, og de er ansvarlige for å holde molekyler sammen i molekylære faste stoffer.

Dobbel kvantebrønn i faste stoffer

I faste stoffer kan doble kvantebrønner oppstå når to atomer, som hydrogenatomer, kommer nær hverandre og danner bindinger. I dette tilfellet vil de individuelle atomene ha deres egne kvantebrønner for elektronene, men når de kommer nærmere hverandre, vil deres kvantebrønner overlappe og danne et nytt system av kvantebrønner. Dette systemet kan analyseres i form av bonding orbitaler og anti-bonding orbitaler.

Bonding orbitaler oppstår når to atomer nærmer seg hverandre, og deres elektronbølgefunksjoner har samme fase. Dette fører til en konstruktiv interferens mellom bølgefunksjonene, noe som resulterer i økt elektrontetthet mellom atomene. Denne økte elektrontettheten skaper en tiltrekkende kraft mellom atomene og stabiliserer bindingen. Bonding orbitaler er derfor lavere i energi enn de isolerte atomorbitalene.

Anti-bonding orbitaler oppstår derimot når de overlappende elektronbølgefunksjonene har motsatte faser. Dette fører til destruktiv interferens og en reduksjon i elektrontetthet mellom atomene. Den reduserte elektrontettheten skaper en frastøtende kraft mellom atomene og destabiliserer bindingen. Anti-bonding orbitaler er høyere i energi enn de isolerte atomorbitalene og bonding orbitalene.

Når det gjelder hydrogenbindinger, vil to hydrogenatomer danne en binding når deres elektronbølgefunksjoner overlapper på en slik måte at det skapes et bonding orbital. Når elektronene befinner seg i bonding orbitalen, vil hydrogenatomene tiltrekkes av hverandre og danne en stabil kovalent binding.

Avstanden mellom kvantebrønnene er relatert til avstanden mellom atomene i det faste stoffet. Når avstanden mellom atomene er stor, vil deres kvantebrønner ha liten overlapping og deres elektroner vil i stor grad være begrenset til deres respektive atomer. Når avstanden mellom atomene reduseres, vil overlappingen av deres kvantebrønner øke, noe som fører til økt mulighet for elektronene å bevege

seg mellom de to atomene. Dette prinsippet om overlapping og superposisjon av bølgefunksjoner er avgjørende for å forstå bindinger og elektroniske egenskaper i faste stoffer.

Oppgave 4

Faste stoffer

Faste stoff er materialer som har en definert form og volum. De kan være krystallinske eller amorfiske, avhengig av den atomære strukturen. Krystallinske materialer har en periodisk, ordnet atomstruktur, mens amorfiske materialer har en mer tilfeldig atomstruktur. I faststoffelektronikk er det ofte krystallinske materialer som er av størst interesse på grunn av deres unike egenskaper.

I de kommende delene av presentasjonen vil vi se nærmere på ulike aspekter av krystallografi og resiprokt rom, og hvordan disse konseptene bidrar til å forstå og beskrive krystallinske materialer og deres egenskaper.

Krystaller, basis og gitter

En krystall er et fast stoff der atomer, ioner eller molekyler er ordnet i et mønster som gjentar seg periodisk i tre dimensjoner. Den periodiske strukturen av en krystall er en direkte konsekvens av den ordnede plasseringen av partikler i materialet, og det er denne periodisiteten som gir krystaller deres unike egenskaper.

For å beskrive krystallstrukturen er det nyttig å bruke begrepene basis og gitter. En basis er en gruppe av atomer, ioner eller molekyler som danner en representativ enhet av krystallstrukturen. Gitteret, derimot, er et abstrakt matematisk konstruksjon som representerer den periodiske gjentakelsen av basisen i rommet. Gitteret kan betraktes som et sett med punkter som representerer posisjonene til basisen, og når basisen gjentas på hvert av disse punktene, dannes den fullstendige krystallstrukturen.

For å illustrere dette, kan vi tenke på et enkelt eksempel som et natriumklorid (NaCl) krystall. I dette tilfellet består basisen av to atomer, et natriumatom og et kloratom. Gitteret er et sett med punkter som representerer den periodiske gjentakelsen av basisen i rommet. Når basisen gjentas på hvert av disse punktene, dannes den krystallinske strukturen av natriumklorid.

Ved å forstå og beskrive krystallar, basis og gitter, kan vi få innsikt i krystallinske materials egenskaper og hvordan de påvirkes av deres periodiske strukturer. I de neste delene av presentasjonen vil vi se nærmere på flere konsepter som er nødvendige for å beskrive og analysere krystallinske strukturer, inkludert einingsceller, Bravaisgitter og kubiske gitter.

Enhetsceller

I dette avsnittet skal vi fokusere på einingsceller, som er en fundamental byggestein i krystallinske materialer og viktig for å forstå deres struktur og egenskaper. En einingscelle er den minste, repeterende enheten av et krystallgitter som inneholder hele krystallstrukturens mønster. Med andre ord, når en einingscelle gjentas periodisk i tre dimensjoner, dannes den fullstendige krystallstrukturen.

Einingsceller kan klassifiseres i henhold til deres geometri og symmetri. Det finnes syv krystallssystemer, som hver kan beskrives med en spesifikk type einingscelle: triklin, monoklin, ortorombisk, tetragonal, trigonal, heksagonal og kubisk. Disse krystallsystemene representerer forskjellige måter å organisere atomer i et krystallgitter og gir opphav til forskjellige krystallinske egenskaper.

Det er viktig å merke seg at einingscellen ikke nødvendigvis er den minste enheten som inneholder alle atomene i en krystallstruktur. Faktisk kan en einingscelle inneholde flere basiser, avhengig av krystallstrukturen. Når vi analyserer krystallinske materialer, er det ofte praktisk å velge den enkleste og mest symmetriske einingscellen som beskriver strukturen, men det kan også være situasjoner der det er nyttig å vurdere andre einingsceller.

For å oppsummere, einingsceller er en nøkkelkomponent i krystallstrukturen og gir oss et verktøy for å beskrive og analysere krystallinske materialer og deres egenskaper. I de neste delene av presentasjonen vil vi se nærmere på andre viktige konsepter i krystallografi, som Bravaisgitter, kubiske gitter og Miller indekser, som alle hjelper oss med å forstå og beskrive krystallinske strukturer på en mer detaljert måte.

Bravaisgitter

Nå skal vi se nærmere på et viktig konsept i krystallografi som hjelper oss med å klassifisere krystallstrukturer, nemlig Bravaisgitter. Et Bravaisgitter er et matematisk konstruksjon som representerer den periodiske gjentakelsen av punkter i rommet. Det finnes totalt 14 forskjellige Bravaisgitter som kan beskrive alle mulige krystallinske strukturer. Disse gitterene er delt inn i syv krystallssystemer som vi nevnte tidligere: triklin, monoklin, ortorombisk, tetragonal, trigonal, heksagonal og kubisk.

Bravaisgitterene er definert ved deres gitterparametere og symmetrier. Gitterparametrene inkluderer gitterkonstantene a , b og c , som representerer lengden av gittervektorene, samt vinklene α , β og γ mellom dem. De 14 Bravaisgitterene er et resultat av alle kombinasjoner av gitterparametere og symmetrier som er mulige innenfor de syv krystallsystemene.

Et viktig aspekt ved Bravaisgitter er at de kun beskriver den geometriske gjentakelsen av punkter i rommet og ikke informasjon om basisen, som inneholder informasjon om atomene, ionene eller molekylene i krystallstrukturen. Når vi kombinerer et Bravaisgitter med en basis, får vi den

fullstendige krystallstrukturen.

Ved å klassifisere krystallstrukturen ved hjelp av Bravaisgitter, kan vi lettere forstå og sammenligne egenskapene til forskjellige materialer. For eksempel kan vi identifisere likheter og forskjeller mellom materialer som har samme Bravaisgitter, men forskjellige basiser, og dermed få innsikt i hvordan atomære arrangementer påvirker deres egenskaper.

I de neste delene av presentasjonen vil vi se nærmere på kubiske gitter og deres varianter, samt Miller indekser, som er viktige konsepter for å beskrive og analysere krystallinske strukturer og deres egenskaper.

Kubiske gitter (fcc, bcc, sc)

I denne delen av presentasjonen skal vi se nærmere på kubiske gitter og deres tre varianter: face-centered cubic (fcc), body-centered cubic (bcc) og simple cubic (sc). Kubiske gitter tilhører det kubiske krystallsystemet og er spesielt viktige i faststoffelektronikk på grunn av deres symmetri og mange praktiske anvendelser.

La oss starte med simple cubic (sc) gitteret. I dette gitteret er atomene plassert i hvert hjørne av en kube. Gitterkonstantene a , b og c er like i lengde, og vinklene α , β og γ er alle 90 grader. Simple cubic gitter er den enkleste typen kubisk gitter, men det finnes ikke mange materialer som naturlig har denne strukturen på grunn av lav pakkingseffektivitet.

Neste er body-centered cubic (bcc) gitteret. I tillegg til hjørneatomene har dette gitteret også et atom i sentrum av kuben. Bcc-gitteret har en høyere pakkingseffektivitet enn sc-gitteret og er typisk for metaller som jern, wolfram og krom.

Sist, men ikke minst, har vi face-centered cubic (fcc) gitteret. I dette gitteret er det atomer i hvert hjørne av kuben, samt i midten av hver av kubens seks flater. Fcc-gitteret har den høyeste pakkingseffektiviteten blant de kubiske gitterene og er typisk for metaller som aluminium, kobber og gull.

Betydningen av disse gittertypene for materialers egenskaper og bruksområder kan ikke understrekes nok. For eksempel er fcc- og bcc-gitterene ofte involvert i mekaniske egenskaper som duktilitet og hardhet, mens sc-gitteret kan være relevant for elektriske egenskaper som ledningsevne.

Ved å forstå og beskrive kubiske gitter og deres varianter, kan vi få innsikt i materialers egenskaper og hvordan de påvirkes av deres krystallinske strukturer. I de neste delene av presentasjonen vil vi se nærmere på Miller indekser, Wigner-Seitz cella, og reelt og resiprokt gitter, som alle hjelper oss med å forstå og beskrive krystallinske strukturer og deres egenskaper på en mer detaljert måte.

Miller indekser

I dette avsnittet skal vi introdusere Miller indekser, som er et viktig verktøy i krystallografi for å beskrive krystallplan og retninger i krystallinske materialer. Miller indekser er en notasjon som består av tre heltall (h , k , l) som er proporsjonale med de resiproke av gitterkonstantene a , b og c langs de tre krystallakser.

Miller indekser brukes til å identifisere og beskrive spesifikke krystallplan i en krystallstruktur. Krystallplan er viktige fordi de påvirker mange fysiske egenskaper, som mekaniske, optiske og elektriske egenskaper. For eksempel, i halvledermaterialer som silisium, kan forskjellige krystallplan påvirke egenskaper som ledningsevne og båndstruktur.

For å beregne Miller indekser for et krystallplan, kan vi følge disse trinnene:

Finn punktene der krystallplanet krysser krystallaksene.

1. Finn punktene der krystallplanet krysser krystallaksene.
2. Ta de resiproke verdiene av disse punktene.
3. Finn minste felles multiplum for å gjøre verdiene til hele tall.
4. Skriv indeksene som (h , k , l).

For eksempel, i et kubisk krystall med gitterkonstant a , hvis et krystallplan krysser x -aksen ved a , y -aksen ved a og z -aksen ved a , vil de resiproke verdiene være 1 , 1 og 1 . Minste felles multiplum er 1 , så Miller indekser for dette planet blir $(1, 1, 1)$.

I tillegg til krystallplan, kan Miller indekser også brukes til å beskrive retninger i krystallinske materialer. For å representere en retning, bruker vi en lignende notasjon, men med vinkelparenteser: $\langle h, k, l \rangle$. Retningene er viktige for å beskrive fenomener som dislokasjoner og spredning av stråling i krystaller.

Miller indekser gir oss en enkel og konsistent måte å beskrive og sammenligne krystallplan og retninger i forskjellige materialer. Ved å forstå og bruke Miller indekser, kan vi få bedre innsikt i hvordan krystallinske strukturer og deres egenskaper er relatert. I de neste delene av presentasjonen vil vi se nærmere på Wigner-Seitz cella, samt reelt og resiprokt gitter, som er viktige konsepter for å forstå og beskrive krystallinske strukturer og deres egenskaper.

Wigner-Seitz cella

I denne delen av presentasjonen vil vi introdusere Wigner-Seitz cella, et annet nyttig konsept i krystallografi som hjelper oss med å forstå og beskrive krystallinske strukturer. Wigner-Seitz cella

er en spesiell type einingscelle som er konstruert rundt et gitterpunkt og inneholder det punktet og alle punktene nærmere det enn noen annet gitterpunkt.

For å konstruere en Wigner-Seitz celle, følg disse trinnene:

1. Velg et gitterpunkt som sentrum av cellen.
2. Tegn linjer fra det valgte gitterpunktet til alle nærmeste naboer.
3. Tegn midtplanene mellom gitterpunktet og hver nabo.
4. Avgrens cellen ved skjæringspunktene mellom midtplanene.

Wigner-Seitz cella har en spesiell egenskap: den inneholder alle symmetriene til det underliggende gitteret og er derfor en representativ enhet for krystallstrukturen. Den gir oss et intuitivt og geometrisk bilde av hvordan atomer, ioner eller molekyler er arrangert i krystallet og deres innbyrdes avstander.

Et viktig konsept relatert til Wigner-Seitz cella er det resiproke gitteret, som vi vil se på i neste del av presentasjonen. Resiprokt gitter er en annen matematisk konstruksjon som hjelper oss med å beskrive krystallinske strukturer og deres egenskaper, spesielt i forbindelse med spredning av bølger og partikler.

Ved å forstå og bruke Wigner-Seitz cella i vår analyse av krystallinske materialer, kan vi få bedre innsikt i deres strukturer og egenskaper, samt deres interaksjon med bølger og partikler. Dette er spesielt viktig i faststoffelektronikk, der krystallstrukturen og dens egenskaper har en direkte innvirkning på materialers elektriske, optiske og mekaniske egenskaper.

Reelt og resiprokt gitter

Til slutt i presentasjonen vil vi se på reelt og resiprokt gitter, to viktige konsepter i krystallografi som hjelper oss med å beskrive og analysere krystallinske strukturer og deres egenskaper.

Reelt gitter er det romlige arrangementet av punkter som representerer periodiske gjentakelser av atomer, ioner eller molekyler i et krystallinsk materiale. Vi har allerede diskutert forskjellige typer reelle gitter, som Bravaisgitter og kubiske gitter. Reelt gitter gir oss en geometrisk beskrivelse av krystallstrukturen og er nyttig for å forstå materialets symmetri og pakkingseffektivitet.

Resiprokt gitter er en matematisk konstruksjon som er relatert til det reelle gitteret, men beskriver materialets egenskaper i en annen måte. I stedet for å representere den fysiske plasseringen av atomer, ioner eller molekyler, representerer det resiproke gitteret bølgevektorer som er forbundet med periodiske egenskaper av krystallet. Resiprokt gitter er spesielt viktig for å forstå og beskrive

fenomener som spredning av bølger og partikler, som røntgen- eller elektrondiffraksjon, i krystallinske materialer.

For å konstruere det resiproke gitteret fra det reelle gitteret, kan vi bruke følgende trinn:

Finn de primitive gittervektorene i det reelle gitteret, merket som a , b og c .

Ved å analysere det resiproke gitteret, kan vi få innsikt i materialets egenskaper, som båndstruktur, gitterdynamikk og spredning av stråling. Dette er spesielt viktig i faststoffelektronikk, der krystallstrukturen og dens egenskaper har en direkte innvirkning på materialers elektriske, optiske og mekaniske egenskaper.

Oppgave 5

Kronig-Penney modellen som en modell for 1D gitter

I denne delen av presentasjonen vil vi se på hvordan Kronig-Penney modellen fungerer som en modell for 1D gitter i faststoffelektronikk.

2a. Hva er et 1D gitter og dets betydning i faststoffelektronikk

Et 1D gitter, eller en eendimensjonal krystallstruktur, er en forenklet representasjon av en krystall der atomene er ordnet i en enkelt lineær kjede. Dette forenklete systemet gjør det lettere å studere elektronisk oppførsel og båndstrukturer i krystaller. Selv om virkelige materialer er tredimensjonale, gir innsikt fra 1D gitter-modeller ofte en grunnleggende forståelse av hvordan elektroner oppfører seg i mer komplekse krystallstrukturer.

2b. Beskrivelse av Kronig-Penney modellen og dens anvendelse

Kronig-Penney modellen er en teoretisk modell som beskriver hvordan elektroner oppfører seg i et 1D gitter. Den tar hensyn til periodiske potensialer som virker på elektronene, noe som gjenspeiler den periodiske naturen til krystallstrukturen. Modellen gir en kvalitativ forståelse av hvordan elektroner oppfører seg i et periodisk potensial og bidrar til å forklare fenomener som båndstrukturer og elektrisk ledningsevne i krystaller.

2c. Matematisk formulering av modellen

Selv om vi ikke vil utlede matematikken bak modellen i detalj, kan vi kort nevne at Kronig-Penney modellen er basert på Schrödinger-ligningen for en partikkel i et periodisk potensial. Den generelle formen for denne ligningen er:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Her er $\psi(x)$ bølgefunksjonen til elektronet, $U(x)$ er det periodiske potensialet, E er energien til elektronet, m er elektronets masse og \hbar er Plancks reduserte konstant.

Ved å løse denne ligningen for et periodisk potensial kan vi finne bølgefunksjonene og energinivåene til elektronene i 1D gitteret. Dette gir oss en kvalitativ forståelse av elektronenes oppførsel og hvordan de danner energibånd i krystallstrukturen.

Forenklinger i Kronig-Penney modellen

I dette avsnittet vil vi se nærmere på forenklingene som er gjort i Kronig-Penney modellen, og hvordan disse påvirker modellens gyldighet og anvendelse.

3a. Idealiseringer og antagelser i modellen

Kronig-Penney modellen er basert på flere idealiseringer og antagelser for å forenkle beregningene og forståelsen av elektronisk oppførsel i et 1D gitter. Noen av disse forenklingene inkluderer:

1. Periodisk potensial: Modellen antar at potensialet som virker på elektronene er periodisk med samme periode som gitteret. Dette er en rimelig antagelse for mange krystallstrukturer, men det er viktig å huske at virkelige materialer kan ha uregelmessigheter og defekter som avviker fra det perfekte periodiske potensialet.
2. Endimensjonalt gitter: Modellen betrakter et 1D gitter i stedet for en tredimensjonal krystallstruktur. Dette er en betydelig forenkling, men som tidligere nevnt, gir det fortsatt verdifull innsikt i elektronisk oppførsel i krystaller.
3. Kontinuerlig bølgefunksjon: Modellen antar at elektronenes bølgefunksjon er kontinuerlig og har kontinuerlige derivater i gitteret. Dette er en matematisk forenkling som gjør det enklere å løse Schrödinger-ligningen.

3b. Begrensninger og gyldighetsområde for modellen

På grunn av disse forenklingene har Kronig-Penney modellen noen begrensninger og er mest relevant for situasjoner der antagelsene er gyldige. Modellen er spesielt nyttig for å forstå kvalitative trekk ved elektroner i periodiske potensialer, som energibånd og dispersjonsrelasjoner. Imidlertid kan modellen gi unøyaktige resultater for materialer med betydelige avvik fra de ideelle forutsetningene, for eksempel uregelmessige krystallstrukturer eller materialer med betydelige defekter.

3c. Potensielle forbedringer eller utvidelser av modellen

For å forbedre nøyaktigheten og anvendelsesområdet for Kronig-Penney modellen, kan man vurdere å inkludere mer realistiske potensialer, for eksempel ved å ta hensyn til ikke-periodiske effekter eller avvik i krystallstrukturen. En annen mulighet er å utvide modellen til to- og tredimensjonale gitterstrukturer for å studere mer realistiske materialer. Disse forbedringene vil naturligvis gjøre beregningene mer kompliserte, men kan gi en mer detaljert og nøyaktig beskrivelse av elektronisk oppførsel i faste stoffer.

Bloch's teorem

Bloch's teorem er et fundamentalt resultat i faststoffelektronikk som beskriver hvordan elektroner oppfører seg i periodiske potensialer, som de som finnes i krystallinske materialer. Dette teoremet gir oss viktige innsikter i forholdet mellom energinivåer og bølgevektor, og er nøkkelen til å forstå båndstrukturen i krystaller.

4a. Introduksjon til Bloch's teorem og dets betydning i faststoffelektronikk

Bloch's teorem er oppkalt etter den sveitsiske fysikeren Felix Bloch, som først formulerte det i 1928. Teoremet sier at bølgefunksjonen til en elektron i et periodisk potensial kan uttrykkes som et produkt av en planbølge og en periodisk funksjon med samme periode som potensialet. Dette resultatet er viktig fordi det gir oss en grunnleggende forståelse av hvordan elektroner oppfører seg i krystallstrukturer, og det gjør det mulig å beregne egenskapene til elektroniske bånd.

4b. Matematisk formulering av teoremet

Bloch's teorem kan matematisk formuleres som følger:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

Her er $\psi_k(x)$ bølgefunksjonen til elektronet, k er bølgevektoren, x er posisjonen, og $u_k(x)$ er en periodisk funksjon med samme periode som gitterpotensialet, det vil si at $u_k(x + a) = u_k(x)$, der a er gitterperioden.

4c. Sammenheng mellom Bloch's teorem og Kronig-Penney modellen

Bloch's teorem er nært knyttet til Kronig-Penney modellen, ettersom begge beskriver oppførselen til elektroner i periodiske potensialer. Kronig-Penney modellen gir en praktisk metode for å løse Schrödinger-ligningen for et 1D gitter, og Bloch's teorem gir oss et generelt rammeverk for å forstå løsningene av denne ligningen.

Ved å bruke Bloch's teorem, kan vi uttrykke bølgefunksjonene til elektronene i Kronig-Penney modellen som et produkt av en planbølge og en periodisk funksjon. Dette forenkler beregningene og gir oss en kvalitativ forståelse av elektronenes oppførsel i gitteret. Spesielt gir Bloch's teorem oss innsikt i hvordan energinivåer og bølgevektor er relatert i krystaller, noe som er viktig for å forstå dispersjonsrelasjonen og effektiv masse, som vi skal se på i de neste delene av presentasjonen.

Løsningene til Kronig-Penney modellen

Nå som vi har en forståelse av Kronig-Penney modellen og Bloch's teorem, kan vi se på hvordan vi finner løsningene til modellen og hva de forteller oss om elektronenes oppførsel i et 1D gitter.

5a. Generelle løsningstrinn og metoder

Å løse Kronig-Penney modellen innebærer å finne bølgefunksjonene og energinivåene til elektronene i det periodiske potensialet. Dette gjøres ved å løse Schrödinger-ligningen med de forenklete antagelsene og begrensningene som er beskrevet tidligere. Bloch's teorem spiller en viktig rolle her, da det lar oss uttrykke bølgefunksjonene som et produkt av en planbølge og en periodisk funksjon.

De generelle trinnene for å løse Kronig-Penney modellen er:

- Skriv ned Schrödinger-ligningen for det periodiske potensialet, som beskrevet tidligere.
- Bruk Bloch's teorem for å uttrykke bølgefunksjonene som et produkt av en planbølge og en periodisk funksjon.
- Løs Schrödinger-ligningen ved hjelp av passende matematiske metoder, for eksempel ved å matche bølgefunksjonene og deres derivater ved grensene mellom potensialbrønnene.
- Finn energinivåene og bølgevektorene til elektronene ved å løse ligningene som er oppnådd fra trinn 3.

5b. Energi-båndstrukturer og deres betydning

Løsningene til Kronig-Penney modellen gir oss energibåndstrukturen til det 1D gitteret. Energibåndstrukturen viser hvordan energinivåene til elektronene er organisert i bånd, med energiområder der elektroner kan eksistere, og energigap der det ikke er tillatt energinivåer for elektronene.

Energibåndstrukturen er viktig for å forstå elektrisk ledningsevne og andre elektroniske egenskaper i krystaller. For eksempel, i metaller har elektroner tilgang til et delvis fylt energibånd, noe som gjør at de lett kan flytte seg og bidra til elektrisk ledningsevne. I isolatorer og halvledere, derimot, er det et energigap mellom fylte og tomme energibånd, noe som hindrer elektroner i å flytte seg fritt og reduserer ledningsevnen.

5c. Typiske resultater og deres tolkning

Løsningene til Kronig-Penney modellen gir oss en kvalitativ forståelse av hvordan elektroner oppfører seg i et 1D gitter. Vi kan se at energibåndstrukturen er et resultat av det periodiske potensialet, og at energigapene oppstår på grunn av interferens

Dispersjonsrelasjonen, $E(k)$

Dispersjonsrelasjonen er en funksjon som beskriver hvordan energinivåene til elektronene i et krystall avhenger av deres bølgevektor, k . Dispersjonsrelasjonen er en viktig egenskap ved krystaller, ettersom den gir oss informasjon om energibåndstrukturen og dermed innsikt i elektriske og optiske egenskaper.

6a. Hva er dispersjonsrelasjonen og dens betydning?

Dispersjonsrelasjonen, $E(k)$, beskriver forholdet mellom energinivåene til elektronene og deres bølgevektor k . Denne relasjonen er viktig for å forstå elektrisk ledningsevne, optiske egenskaper og termiske egenskaper i krystallinske materialer. For eksempel gir dispersjonsrelasjonen oss informasjon om hvordan elektroner beveger seg gjennom materialet og hvordan de reagerer på ytre påvirkninger, som elektriske felt eller lys.

6b. Beregning av dispersjonsrelasjonen fra Kronig-Penney modellen

Når vi løser Kronig-Penney modellen, som beskrevet tidligere, kan vi beregne dispersjonsrelasjonen ved å finne energinivåene for ulike verdier av bølgevektoren k . Dette gir oss en funksjon $E(k)$ som beskriver hvordan energien til elektronene endrer seg med bølgevektoren.

6c. Typiske trekk ved dispersjonsrelasjonen og deres tolkning

Dispersjonsrelasjonen for et 1D gitter kan ha forskjellige egenskaper avhengig av materialet og potensialet som er involvert. Noen typiske trekk ved dispersjonsrelasjonen inkluderer:

- **Energi-bånd:** Energibånd er områder der elektroner kan eksistere, og de oppstår som et resultat av det periodiske potensialet. Disse båndene er adskilt av energigap, som er områder der det ikke er tillatt energinivåer for elektronene.
- **Båndgapsstørrelse:** Størrel

Effektiv masse

Effektiv masse er et viktig konsept i faststoffelektronikk, da det gir oss en enkel og nyttig beskrivelse av hvordan elektroner oppfører seg i et krystallinske materialer. Den effektive massen tar hensyn til interaksjonen mellom elektronene og det periodiske potensialet og gir oss en måte å forstå og beskrive deres oppførsel på en forenklet måte.

7a. Hva er effektiv masse og dens betydning?

Effektiv masse er en parameter som beskriver hvordan elektronenes dynamikk i et krystallinsk materiale er påvirket av det periodiske potensialet. Den effektive massen gir oss en måte å behandle

elektronene som om de var frie partikler med en justert masse, som tar hensyn til deres interaksjon med det periodiske potensialet. Dette forenkler betraktelig beregningene og gir oss innsikt i elektronenes oppførsel i forskjellige materialer.

Effektiv masse er viktig for å forstå elektrisk ledningsevne, termiske egenskaper og optiske egenskaper i krystallinske materialer. Den effektive massen påvirker for eksempel hvordan elektroner beveger seg under påvirkning av elektriske felt og hvor raskt de kan akselerere eller bremse.

7b. Beregning av effektiv masse fra dispersjonsrelasjonen

Effektiv masse kan beregnes fra dispersjonsrelasjonen, $E(k)$, som er funnet ved å løse Kronig-Penney modellen. Den effektive massen er gitt av den andre deriverte av dispersjonsrelasjonen med hensyn til bølgevektoren k :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}}$$

Her er \hbar Plancks reduserte konstant.

7c. Typiske egenskaper og tolkning av effektiv masse

Effektiv masse kan ha forskjellige verdier avhengig av materialet og det periodiske potensialet. Noen typiske egenskaper og tolkninger av effektiv masse inkluderer:

- Effektiv masse kan være større eller mindre enn den faktiske massen til et fritt elektron, avhengig av interaksjonen mellom elektronene og det periodiske potensialet. En større effektiv masse betyr at elektronene beveger seg tregere i materialet og er mindre responsive på ytre påvirkninger.
- Effektiv masse kan variere med energi og bølgevektor, noe som reflekterer forskjellige oppførsel i forskjellige energibånd og områder av båndstrukturen.
- Materialer med lav effektiv masse, som ofte finnes i halvledere, gir lettere akselerasjon av ladningsbærere og bedre respons på elektriske felt, noe som kan gi gode elektroniske og optiske egenskaper.

Oppgave 6

Båndstruktur i 1. Brillouinsone

I dette avsnittet vil jeg forklare begrepet Brillouin-soner og deres betydning for båndstrukturen. En Brillouin-sone er et område i gjensidig rom, som representerer de forskjellige bølgevektorene (k -vektorer) for elektronene i et krystallinsk materiale. Den første Brillouin-sonen er den minste og enkleste av Brillouin-sonene og er avgrenset av Bragg-planene.

For å forstå hvorfor Brillouin-soner er viktige for båndstrukturen, la oss først se på krystallstrukturen i et fast stoff. Krystallstrukturen i et fast stoff er et periodisk arrangement av atomer som danner et gitter. Gitteret er beskrevet av gittervektorene, som er de minste vektorene som forbinder gitterpunktene.

Når elektronene i et krystallinsk materiale beveger seg gjennom gitteret, vil de oppleve en periodisk potensial som påvirker deres bølgefunksjon. Dette resulterer i at elektronenes energinivåer blir samlet i bånd, som danner båndstrukturen. Båndstrukturen gir en detaljert beskrivelse av elektronenes energinivåer og bevegelser i et materiale, og er derfor viktig for å forstå de elektriske og optiske egenskapene til materialet.

Den første Brillouin-sonen er spesielt viktig for båndstrukturen fordi den inneholder de mest relevante k -vektorene for elektronene i materialet. Disse k -vektorene bestemmer elektronenes energinivåer og bidrar til dannelsen av energibåndene. Siden den første Brillouin-sonen inneholder de laveste energinivåene, er den mest relevant for å forstå de grunnleggende egenskapene til materialet, som for eksempel ledningsevne og optiske egenskaper.

For å visualisere båndstrukturen i den første Brillouin-sonen, kan vi plote energinivåene som funksjon av k -vektorene. Dette gir oss et bånddiagram, som viser energibåndene og deres avhengighet av k -vektorene. Ved å analysere bånddiagrammet kan vi få verdifull innsikt i materialets egenskaper, som for eksempel ledningsevne, båndgap og optiske egenskaper.

Tilstandstettleik (DOS)

Tilstandstetthet, eller Density of States (DOS), er et viktig konsept i forståelsen av båndstrukturen og elektriske egenskaper til et materiale. Tilstandstetthet beskriver antallet tilgjengelige energinivåer for elektroner per energienhetsintervall i et gitt materiale. Med andre ord, den angir hvor tett energinivåene er pakket sammen i materialets båndstruktur.

For å beregne tilstandstettheten, kan vi bruke følgende generelle formel:

$$D(E) = \frac{dN}{dE}$$

hvor $D(E)$ er tilstandstettheten ved energi E , og dN og dE er henholdsvis antallet tilstander og energiintervallet. Denne formelen kan bli mer komplisert avhengig av materialets båndstruktur og dimensjonalitet, men hovedkonseptet er det samme.

Ved å analysere tilstandstettheten, kan vi få innsikt i hvor sannsynlig det er for elektroner å befinne seg på bestemte energinivåer. For eksempel vil et høyt DOS-verdi ved en gitt energi bety at det er mange tilgjengelige energinivåer for elektroner, og dermed øker sannsynligheten for at elektroner vil befinne seg på disse nivåene. Dette er spesielt viktig når vi vurderer ledningsevne og optiske egenskaper til et materiale, da disse egenskapene er sterkt påvirket av elektronenes energinivåer og deres sannsynlighet for å bli okkupert.

For eksempel, i halvledere vil tilstandstettheten i valensbåndet og ledningsbåndet være avgjørende for å forstå hvordan elektroner og hull bidrar til materialets ledningsevne. En høy DOS i valensbåndet betyr at det er mange tilgjengelige energinivåer for elektroner, noe som gjør det lettere for dem å bli eksitert og skape hull. På samme måte vil en høy DOS i ledningsbåndet bety at det er mange ledige energinivåer for elektroner som er eksitert fra valensbåndet, noe som øker ledningsevnen.

Tilstandstettheten kan bli visualisert ved å plotte DOS som funksjon av energi. Dette gir oss et DOS-diagram, som gir oss et visuelt bilde av hvordan energinivåene er distribuert i materialet. Ved å sammenligne DOS-diagrammer for forskjellige materialer, kan vi få innsikt i deres relative elektriske og optiske egenskaper og dermed velge det mest passende materialet for en gitt anvendelse.

Fermi-Dirac fordelinga

Fermi-Dirac-fordelingen er et annet sentralt konsept for å forstå båndstrukturen og de elektriske egenskapene til et materiale. Fermi-Dirac-fordelingen beskriver sannsynligheten for at en gitt energitilstand er okkupert av et elektron ved en bestemt temperatur. Den er spesielt viktig for å forstå hvordan elektroner og hull bidrar til ledningsevnen i et materiale, siden den gir oss informasjon om hvilke energinivåer som er mest sannsynlig å bli okkupert av elektroner.

Fermi-Dirac-fordelingen er gitt ved følgende formel:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

hvor $f(E)$ er sannsynligheten for at en energitilstand med energi E er okkupert av et elektron, E_F er Fermi-energien, k_B er Boltzmanns konstant, og T er temperaturen.

Fermi-energien er et viktig konsept i forståelsen av Fermi-Dirac-fordelingen og båndstrukturen. Det er den energien ved hvilken sannsynligheten for at en energitilstand er okkupert av et elektron er 50

Temperaturen påvirker også Fermi-Dirac-fordelingen, da høyere temperaturer vil resultere i at flere elektroner blir eksitert til høyere energinivåer, og dermed øke ledningsevnen. Dette er spesielt viktig for halvledermaterialer, hvor ledningsevnen er sterkt temperaturavhengig.

Ved å analysere Fermi-Dirac-fordelingen i forbindelse med båndstrukturen og tilstandstettheten, kan vi få en mer fullstendig forståelse av hvordan elektroner og hull bidrar til materialets ledningsevne og optiske egenskaper. For eksempel, i et halvledermateriale kan vi bruke Fermi-Dirac-fordelingen for å finne sannsynligheten for at et bestemt energinivå i valensbåndet er okkupert av et elektron og dermed bidrar til dannelsen av hull.

Fermi-Dirac-fordelingen kan visualiseres ved å plote sannsynligheten for okkupasjon som funksjon av energi. Dette gir oss et bilde av hvordan elektronene er distribuert over energinivåene i materialet og hjelper oss med å forstå hvordan de elektriske og optiske egenskapene til materialet påvirkes av temperatur og Fermi-energi.

Elektron og hull i båndstrukturen

Elektroner og hull er to fundamentale konsepter i båndstrukturen som er avgjørende for å forstå materialets elektriske egenskaper, spesielt i halvledere. I dette avsnittet vil jeg forklare begrepene elektroner og hull og hvordan de oppstår i båndstrukturen.

Elektroner er negativt ladede partikler som befinner seg i energibåndene i et materiale. I isolatorer og halvledere er elektronene vanligvis konsentrert i valensbåndet, som er det høyeste energibåndet som er helt fylt med elektroner ved absolutt null temperatur. Når elektroner får tilført energi, for eksempel fra termisk agitasjon eller lysabsorpsjon, kan de bli eksitert fra valensbåndet til ledningsbåndet, som er det neste høyeste energibåndet over valensbåndet.

Hull er en positivt ladet "mangel" på elektroner i valensbåndet som oppstår når elektroner blir eksitert til ledningsbåndet. Hull kan tenkes på som de tomme plassene som elektronene etterlater seg i valensbåndet når de blir eksitert. Selv om hull ikke er fysiske partikler, kan de behandles som kvasepartikler som bidrar til materialets ledningsevne.

Ledningsevnen i et materiale er i stor grad bestemt av antallet elektroner og hull og deres mobilitet. I metaller, hvor valensbåndet og ledningsbåndet overlapper, er det et stort antall elektroner som er fritt tilgjengelige for å delta i ledning. I halvledere, derimot, er det en energigap mellom valensbåndet og ledningsbåndet, og dermed færre elektroner og hull tilgjengelige for å lede strøm.

Båndstruktur i 3D

Så langt har vi diskutert båndstrukturen i en forenklet, eendimensjonal form. Imidlertid er krystallinske materialer vanligvis tredimensjonale, og det er derfor viktig å forstå hvordan båndstrukturen utvider seg til 3D. I en tredimensjonal båndstruktur vil energibåndene og k -vektorene (bølgevektorene) bli påvirket av materialets krystallstruktur og symmetri i alle tre dimensjoner.

I en 3D-båndstruktur er det vanlig å beskrive energibåndene som funksjon av k -vektorene i det gjensidige rommet, som er en tredimensjonal Fourier-transformasjon av det virkelige rommet. For å visualisere båndstrukturen i 3D, kan vi plote energinivåene som funksjon av k -vektorene langs høytsymmetriretningene i det gjensidige rommet. Dette gir oss et 3D-bånddiagram som viser hvordan energibåndene varierer i de tre dimensjonene.

3D-båndstrukturen gir en mer komplett beskrivelse av elektronenes energinivåer og bevegelse i et materiale, og er derfor viktig for å forstå materialets elektriske og optiske egenskaper. For eksempel kan en tredimensjonal analyse av båndstrukturen gi oss innsikt i hvordan elektronenes mobilitet og ledningsevnen i materialet påvirkes av krystallstruktur og symmetri. I tillegg kan 3D-båndstrukturen hjelpe oss med å identifisere og forstå eksotiske kvantefenomener som topologiske isolatorer og Weyl-semimetaller.

Det er verdt å merke seg at beregning og visualisering av 3D-båndstrukturen kan være mer komplisert og tidkrevende enn i 1D-tilfellet. Det finnes imidlertid en rekke verktøy og teknikker, både eksperimentelle og teoretiske, som kan hjelpe oss med å studere 3D-båndstrukturen i materialer, for eksempel elektronisk båndstrukturberegning ved hjelp av tetthetsfunksjonell teori (DFT) og målinger av elektronisk struktur ved hjelp av fotoemisjonsspektroskopi.

Direkte og indirekte båndgap

Når vi snakker om båndgap i materialer, spesielt i halvledere, er det viktig å skille mellom direkte og indirekte båndgap. Dette skillet har betydning for materialets optiske og elektroniske egenskaper og påvirker dets anvendelser i ulike teknologier, som f.eks. solceller og lysdioder (LEDs).

Et direkte båndgap er en situasjon der det laveste energinivået i ledningsbåndet og det høyeste energinivået i valensbåndet har samme k -vektor (bølgevektor) i det gjensidige rommet. I et materiale med direkte båndgap kan elektroner overgå direkte mellom valensbåndet og ledningsbåndet ved å absorbere eller emitte fotoner uten å endre k -vektoren betydelig. Dette gjør at direkte båndgap-materialer er effektive lysabsorbenter og -emittere, og derfor er mye brukt i optoelektroniske applikasjoner som solceller og lysdioder.

Et indirekte båndgap er en situasjon der det laveste energinivået i ledningsbåndet og det høyeste energinivået i valensbåndet har forskjellige k -vektorer i det gjensidige rommet. I et materiale med

indirekte båndgap må elektroner endre både energi og k -vektor for å overgå mellom valensbåndet og ledningsbåndet. Dette innebærer at de må samhandle med fotoner og fononer (krystallgittervibrasjoner) samtidig. Denne prosessen er mindre sannsynlig enn den direkte overgangen, og derfor er indirekte båndgap-materialer generelt mindre effektive som lysabsorbenter og -emittere.

Valget mellom direkte og indirekte båndgap-materialer avhenger av den spesifikke applikasjonen og de ønskede egenskapene. For eksempel er direkte båndgap-materialer som galliumarsenid (GaAs) og indiumfosfid (InP) mye brukt i høyhastighets elektronikk og optoelektronikk på grunn av deres gode lysabsorpsjon og -emisjonsegenskaper. På den annen side er indirekte båndgap-materialer som silisium (Si) og germanium (Ge) mye brukt i elektronikk på grunn av deres gode elektriske egenskaper og tilgjengelighet, selv om deres optiske egenskaper er mindre gunstige sammenlignet med direkte båndgap-materialer.

Forenkla bånddiagram

Et forenklet bånddiagram er en skjematisk representasjon av båndstrukturen til et materiale som fokuserer på hovedtrekkene som er viktige for å forstå materialets elektriske og optiske egenskaper. Forenkla bånddiagrammer brukes ofte for å illustrere konsepter som båndgap, elektroner og hull, og direkte og indirekte overganger på en enkel og lettfattelig måte.

For å tegne et forenklet bånddiagram, kan du følge disse trinnene:

- Tegn to horisontale linjer for å representere valensbåndet (nederste linje) og ledningsbåndet (øverste linje). Valensbåndet inneholder elektronene i de høyeste okkuperte energinivåene, mens ledningsbåndet inneholder de laveste ledige energinivåene.
- Angi båndgapet mellom valensbåndet og ledningsbåndet ved å tegne en loddrett avstand mellom de to linjene. Båndgapet representerer energiforskjellen mellom det høyeste okkuperte energinivået i valensbåndet og det laveste ledige energinivået i ledningsbåndet.
- Hvis det er relevant, merk om materialet har et direkte eller indirekte båndgap ved å plassere en pil som representerer en direkte overgang (samme k -vektor) eller en indirekte overgang (forskjellig k -vektor) mellom valensbåndet og ledningsbåndet.
- For å vise elektroner og hull i båndstrukturen, tegn små sirkler eller prikker i valensbåndet (elektroner) og ledningsbåndet (hull). Antall elektroner og hull kan variere avhengig av materialets type og dopingnivå.
- Hvis det er relevant, indiker Fermi-energien ved å tegne en horisontal stiplede linje som krysser bånddiagrammet. Fermi-energien gir informasjon om sannsynligheten for at en gitt energitilstand er okkupert av et elektron.

Et forenklet bånddiagram kan brukes for å illustrere og forklare mange viktige konsepter innen faststoffelektronikk, som f.eks. hvordan elektroner og hull bidrar til ledningsevnen i et materiale, hvordan direkte og indirekte båndgap påvirker materialets optiske egenskaper og hvordan temperaturen og doping påvirker Fermi-energien og ledningsevnen.