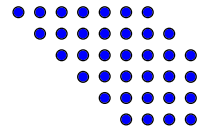
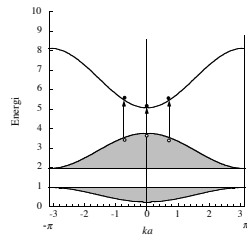
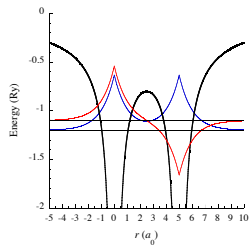


# Materialuppbyggnad

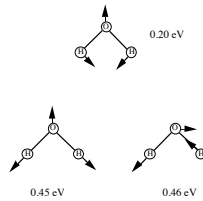
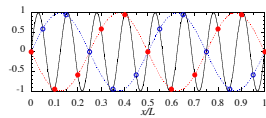


Kompletteringskompendium för kursen

## Elektromagnetism TFYA48



Våren 2009



Bo E. Sernelius

<b>1. FÖRORD</b> .....	<b>3</b>
<b>2. INLEDNING</b> .....	<b>4</b>
LITE KVANTMEKANIK .....	6
Dubbelspaltexperimentet .....	7
Partikel i låda.....	10
Bohrs atommodell .....	11
Partikel-våg dualism.....	13
Paulis uteslutningsprincip .....	14
<b>3. MATERIENS UPPBYGGNAD</b> .....	<b>15</b>
<b>4. ELEKTRISK LEDNINGSFÖRMÅGA I FASTA KROPPAR</b> .....	<b>23</b>
<b>OPTISKA EXCITATIONER</b> .....	<b>27</b>
ROTATIONER .....	29
VIBRATIONER .....	31
ELEKTRONISKA EXCITATIONER .....	31
FONONER .....	34
<b>5. DIELEKTRICITETSFUNKTIONEN</b> .....	<b>41</b>
HALVLEDARE ELLER ISOLATOR .....	41
METALL .....	43
NÅGRA SLUTORD .....	44

## 1. Förord

Det här kompendiet är ett komplement till kursboken. Syftet är dels att ge D-studenten en djupare förståelse för växelverkan mellan elektromagnetiska vågor och material, dels att ge en inblick i egenskaperna hos de material som komponenterna i datorer och elektronik är tillverkade av – D-studentens främsta verktyg. För att kunna göra en någotsånär realistisk beskrivning av materien och växelverkan mellan strålning och materia måste jag beröra svåra ämnen som kvantmekanik och partikel-våg dualism. Jag försöker att göra beskrivningen så enkel som möjligt och undviker att tränga djupare in i formalismen än vad som är absolut nödvändigt.

Överstad våren 2009  
Bo E. Sernelius

## 2. Inledning

En laddning i vila ger upphov till ett elektriskt fält enligt Coulombs lag (ekv 4:2 i kursboken),

$$\mathbf{E} = \frac{q\hat{r}}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \quad (1)$$

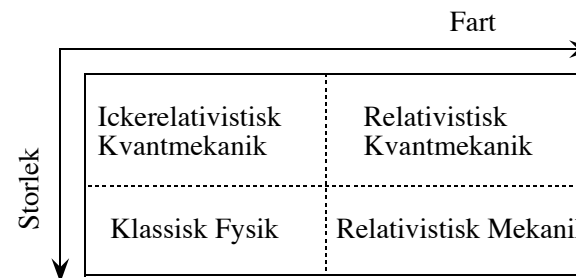
Om vi nu låter laddningen röra sig med konstant hastighet följer fältet med laddningen. Fältet modifieras något och det uppstår dessutom ett magnetiskt fält som också följer med laddningen. Vi har alltså två fält, ett elektriskt och ett magnetiskt, som stelt följer med laddningen. Fälten är koncentrerade till laddningen och styrkorna avtar med kvadraten på avståndet.

Om vi nu accelererar laddningen antingen genom att öka dess fart eller böja av dess bana så frigör sig en del av fälten från laddningen och fortskrider på egen hand. Vi har åstadkommit elektromagnetisk strålning, en elektromagnetisk våg som fortskrider genom rummet. En unik egenskap hos Maxwells ekvationer är att de har lösningar i vakuum. En elektromagnetisk våg behöver inget medium att fortskrida i till skillnad från t.ex. ljudvågor. När vi talar till varandra fortskrider ljudvågorna i luften, vid en ultraljudsundersökning av en njurstenspatient fortskrider ljudvågen i biologisk vävnad, vid en ultraljudsundersökning av eventuella sprickor i kylanläggningen vid ett kärnkraftverk fortskrider ljudvågen i metall, när valar kommunicerar med varandra på långa avstånd fortskrider ljudvågorna i havsvattnet, vid en jordbävning fortskrider ljudvågorna genom jorden och detekteras av seismografer... Det är mycket tursamt att elektromagnetiska vågor kan ta sig fram utan något medium; annars skulle solens strålar aldrig nå oss; vi skulle inte ha någon nytta av våra ögon; vi skulle inte ha TV- och radioutsändningar; mobil- och satellittelefoner skulle vara obrukbara...

Om nu vågen vi har genererat passerar genom något medium så påverkas vågen av mediet och mediet påverkas av vågen – vi har en växelverkan mellan strålning och materia. Orsaken är att mediet innehåller laddade partiklar. Dessa påverkas av Lorentzkraften,

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2)$$

De accelereras och sänder i sin tur ut strålning. Effekten blir dels att energi absorberas från den inkommande vågen, dels andra effekter såsom reflektion och brytning vid ytor och att vågen får en annan fortskridningshastighet. Beteendet beror på materialet och dessutom fås olika fenomen vid geometriska strukturer. Vi kommer att senare i kursen behandla diffraktion av ljus i spalter och interferensmönster från gitter. Dessa effekter är resultatet av ljusets vågkaraktär. Ljus, och elektromagnetiska vågor av alla andra våglängder, har också partikelkaraktär. Vi kommer att diskutera det i avsnittet partikel-våg dualismen. I den här texten koncentrerar vi oss på vad som händer när en våg passerar genom bulken (det inre) av ett homogent material där vi inte har komplikationer från ytor eller geometriska strukturer. Vi börjar med att diskutera hur material byggs upp och avslutar med hur de dielektriska egenskaperna hos materialen uppkommer. Innan vi kommer till uppbyggnaden av material måste vi behandla lite bakgrundsmaterial. Vi behöver studera lite kvantmekanik.



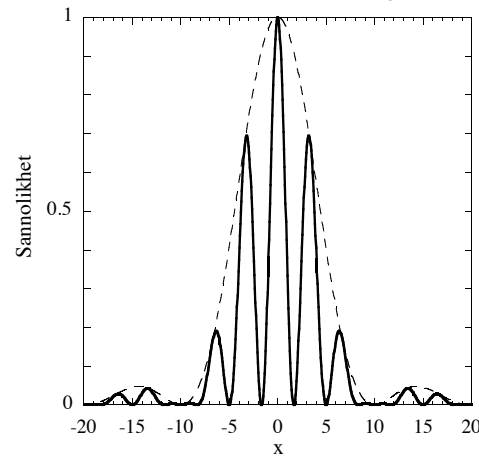
Figur 1: Fysikformalismens fyra hörn

### Lite kvantmekanik

I vår vardag är vi vana vid att föremålen omkring oss är ganska stora – makroskopiska. Om de inte rör sig alltför snabbt beskrivs fysiken gott av den klassiska mekaniken, nedre vänstra hörnet av Figur 1. Om de rör sig med hastigheter nära  $c$ , ljushastigheten i vakuum, tillkommer relativistiska effekter. Det ska vi inte diskutera här. Om föremålen vi betraktar väljs mindre och mindre kommer vi så småningom till en punkt där de klassiska lagarna inte längre gäller. Vi ser kvantmekaniska effekter. Det ska vi diskutera här. Dessa effekter kan vara svåra eller kanske rent av omöjliga att förstå sig på. Vi är ju vana vid att omge oss med makroskopiska föremål och all vår erfarenhet baseras på detta. Vi upptäcker att de små föremålen även har vågkaraktär. Kanske det mest tydliga experimentet som visar detta är dubbelspaltexperimentet. Vi kommer att diskutera dubbelspaltexperimentet, partikel i låda, Bohrs atommodell, partikel-våg dualismen och Paulis uteslutningsprincip. Vi börjar med dubbelspaltexperimentet.

## Dubbelspaltexperimentet

En partikel är ett föremål med försumbar utsträckning. Vi tror i dag att elektronen är en verklig partikel, dvs. inte har någon utsträckning alls. I dubbelspaltexperimentet skickar man en ström av partiklar, t.ex. elektroner, mot en skärm med två spalter. Bakom skärmen finns en annan skärm som detekterar var partiklarna träffar. Varje träff resulterar i en punkt på skärmen. Detta visar partiklarnas partikelkaraktär. När experimentet får fortgå ett tag växer ett spektrum fram enligt Figur 1. Man finner att punkterna inte bildar en diffus topp utan det blir alternerande mörka och ljusa band. I vissa punkter hamnar inga partiklar alls. Resultatet är precis som vid ett optiskt dubbelspaltexperiment. Om man håller för ena spalten försvinner interferensmönstret och man får resultatet enligt enveloppen till kurvan, den streckade kurvan i figuren.



**Figur 2:** Figuren visar uppmätt fördelning av partikelträffar bakom en dubbelspalt. Den streckade kurvan är motsvarande resultat bakom en enkelspalt.

Hur kan man förklara det här? Man skulle kunna tro att partiklarna i strömmen rör sig på ett korrelerat sätt och därmed orsakar mönstret. Så är inte fallet. Om man minskar partikelströmmen till den grad att ingen ny partikel kommer in mot skärmen med dubbelspalten förrän den föregående har registrerats på den bakomvarande skärmen så får

man ändå samma diffraktionsmönster. Det visar att partikeln ibland uppträder som en våg och vågen passerar genom båda spalterna. Den uppträder också som en partikel. Varje partikel gav ju bara upphov till en punkt på den bakre skärmen.

För en fri partikel gäller följande samband för dess rörelsemängd och energi

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} \hat{k}; \quad \hbar = h/2\pi, \text{ där } h \text{ är Plancks konstant}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3)$$

$$E = \hbar\omega,$$

där  $\mathbf{k}$  kallas vågvektorn och  $\lambda$  är våglängden hos den våg som karakteriserar partikeln. Vågen kallas partikelns vågfunktion. Vågfunktionen, som för en fri partikel kan skrivas som

$$\psi(\mathbf{r}, t) = C e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - Et/\hbar)} = C e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (4)$$

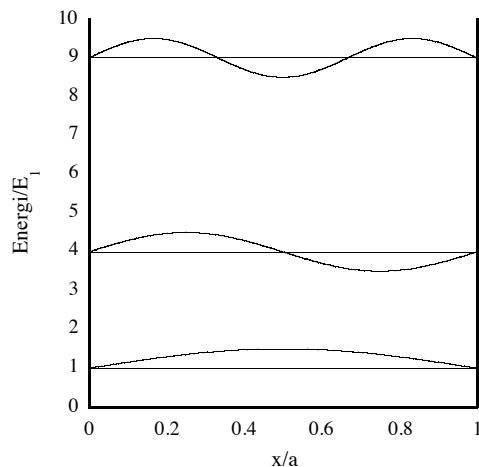
hör samman med sannolikheten att finna partikeln i punkten  $\mathbf{r}$  vid tiden  $t$ . Vågen rör sig i  $\mathbf{k}$ s riktning, dvs. i den riktning partikeln rör sig. Sannolikhetstätheten är beloppet av den komplexvärda vågfunktionen i kvadrat,

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = |C|^2, \quad (5)$$

dvs. för en fri partikel är det samma chans att finna partikeln i varje punkt i rummet. I dubbelspaltexperimentet delas vågen upp mellan spalterna och delvågorna interfererar med varandra på exakt samma sätt som i ett optiskt experiment. Man kan därför inte i efterhand säga genom vilken spalt partikeln passerade. I någon mening kan man påstå att partikeln passerade genom båda spalterna. Sådana här bisarra effekter dyker upp i kvantmekaniken och ställer våra klassiska begrepp och erfarenheter på ända.

Från sambandet mellan rörelsemängd och våglängd, i ekvation (3), ser vi att en stor rörelsemängd ger en liten våglängd. Varför ser vi inte vågkaraktären hos makroskopiska föremål? Låt oss ta ett exem-

pel. Vi studerar en kub med sidan 1 cm och med samma densitet som vatten. Den väger då 1 gram. För att interferenseffekterna vid passerandet av en geometrisk struktur ska synas måste längdskalan hos strukturen och våglängden hos föremålet eller ljuset vara av samma storleksordning. Om våglängden är mycket mindre syns inga effekter. Ur sambanden får vi att föremålet skulle behöva röra sig långsammare än  $6.6 \times 10^{-29} \text{ m/s}$  för att våglängden ska vara längre än föremålets utsträckning. En sådan låg hastighet är orimlig. Alltså måste spalterna i dubbelspaltexperimentet vara smalare än föremålets utsträckning för att interferenseffekter ska uppkomma. Ett sådant experiment är omöjligt att genomföra för då skulle inte föremålets kunna passera igenom spalterna. Det förklarar varför vi inte ser kvanteffekterna. Våglängden är ofantligt mycket kortare än de makroskopiska föremålens utsträckning. Ju mindre föremålen är desto längre är deras våglängder och man når en kritisk gräns där kvanteffekterna framträder. Vi betraktar nu ett annat exempel där kvanteffekterna framträder, partikel i låda.



**Figur 3:** Vågfunktionerna för de tre lägsta energinivåerna i en låda. Varje vågfunktion är ritad kring motsvarande energinivå.

## Partikel i låda

Partikel i låda är ett klassiskt problem i kvantmekaniken som tidigare bara introducerades för att teoretiskt visa på kvanteffekter. Numera är det ett reellt problem. Med nya tekniker (MBE, Molecular Beam Epitaxi) är det möjligt att skapa sådana strukturer i verkligheten; de kallas kvantbrunnar. Vi stänger in en partikel i en potentialgrop med bredd  $a$  och oändligt höga väggar, se Figur 3. Låt partikeln röra sig åt höger i positiva  $x$ -riktningen. Vågvektorn är då riktad i positiva  $x$ -riktningen. Partikeln kommer att studsas mot den högra väggen, byta riktning och röra sig i negativa  $x$ -riktningen, studsas mot den vänstra väggen, byta riktning osv. När partikeln rör sig åt höger är dess vågfunktion

$$\psi(r,t) = C_1 e^{i(kx - Et/\hbar)}, \quad (6)$$

när den rör sig åt vänster är den

$$\psi(r,t) = C_2 e^{i(-kx - Et/\hbar)}. \quad (7)$$

Alla dessa vågor som uppkommer mellan studsarna superponeras, adderas. Om inte våglängden är den rätta släcker vågorna ut varandra. Om avståndet mellan väggarna är en jämn multipel av halva våglängden så förstärker vågorna varandra. Vi har följande samband för energi, vågtal och vågfunktion för de möjliga tillstånden.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{2a/n} \right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}; \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$k = \pm n\pi/a \quad (8)$$

$$\psi_n = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a) \exp(-i\hbar\pi^2 n^2 t/2ma^2).$$

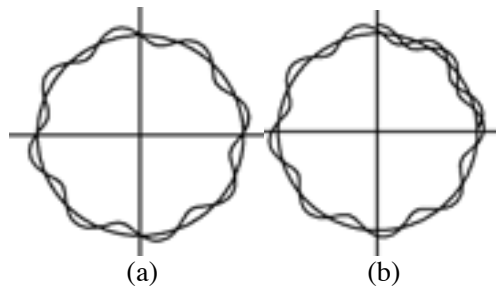
Vågfunktionen är normerad så att sannolikheten att finna partikeln i lådan är ett.

$$\int_0^a |\psi_n|^2 dx = \int_0^a (2/a) \sin^2(n\pi x/a) dx = 1 \quad (9)$$

Ett klassiskt föremål kan ha en godtycklig energi. Det kan inte en partikel ha när lådan är tillräckligt liten. Det beror på partikelns vågkaraktär och är resultatet av konstruktiv och destruktiv interferens.

### Bohrs atommodell

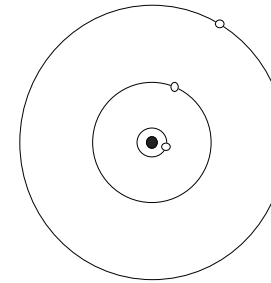
Vi studerar nu ett lite annorlunda exempel – Bohrs atommodell. I det här fallet är det en negativt laddad elektron som rör sig i en bana kring den positivt laddade atomkärnan. Elektronen beskrivs med en våg som går runt i en cirkelbana kring kärnan. Att elektronen beskrivs som en våg innebär att vi delvis behandlar problemet kvantmekaniskt. Det är en halvklassisk beskrivning; elektronen följer en klassisk bana men beskrivs med en vågfunktion utmed banan. Om våglängden är sådan att när vågen har gått runt ett varv så är den i fas med sig själv så får vi konstruktiv interferens annars destruktiv.



**Figur 4: Schematisk bild av vågfunktionen i Bohrs atommodell. (a) Det får plats ett helt antal våglängder utmed banan. Vi har konstruktiv interferens och banan accepteras. (b) Det får inte plats ett helt antal våglängder utmed banan. Vi har destruktiv interferens och banan förkastas.**

Villkoret för ett tillstånd, sambandet mellan rörelsemängd och våglängd, och uttrycket för centripetalkraften i en cirkulär rörelse är:

$$\begin{aligned} n\lambda &= 2\pi r \\ mv &= \hbar k = \hbar 2\pi/\lambda \\ m \frac{v^2}{r} &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}. \end{aligned} \quad (10)$$



**Figur 5: Cirkulära elektronbanor runt kärnan i Bohrs atommodell.**

Jag har här utvidgat behandlingen från väteatomen till väteliknande atomer genom att låta kärnan ha fler än en proton. Valenstalet  $Z$  anger detta antal. Kombination av sambanden ger

$$\begin{aligned} v &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}; \\ r &= \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{mZe^2} = \frac{n^2}{Z} a_0; \\ E_n &= \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} Ry. \end{aligned} \quad (11)$$

De erhållna energivärdena är helt i linje med resultaten från en fullständig, kvantmekanisk härledning. Jag har infört två konstanter, Bohrradien  $a_0$  och energienheten Rydberg,  $Ry$ .

Jag nämnde tidigare att en laddning som accelereras sänder ut strålning. Elektronen som rör sig utmed en bana i atomen accelereras ju och bör sända ut strålning. Elektronen i den lägsta energinivån gör inte det. Den kan inte sänka sin energi. Det är en ytterligare effekt av kvantmekanikens lagar. Vidare kan elektroner i högre energinivåer bara sända ut strålning med diskreta energiinnehåll som passar precis med energiskillnaden till en lägre energinivå. Atomer har linjespektra både vid absorption och vid emission.

## Partikel-våg dualism

Jag visade i de tidigare avsnitten att partiklar även har vågkaraktär. Detta ledde till att elektrontillstånden i atomer, eller andra geometriska strukturer med små dimensioner, har diskreta energier. Nu gäller att även elektromagnetiska vågor har partikelkaraktär. Einstein fick sitt Nobelpris för den fotoelektriska effekten inte, som man skulle kunna tro, för relativitetsteorin.

När en metallyta belyses med ljus av tillräckligt kort våglängd, kommer elektroner att emitteras. Fotoströmmen, det vill säga antalet elektroner som utsänds per tidsenhet, är direkt proportionell mot ljusets intensitet, hur låg intensiteten än är. Men för våglängder som är längre än gränsvåglängden sker ingen fotoemission alls, även om ljuset har stark intensitet. För de flesta metaller behövs ultraviolett ljus, men för några metaller ligger denna tröskel vid längre våglängder, i det synliga området. Effekten är förvånande när man beskriver ljuset som en elektromagnetisk våg, där den växlande elektriska fältstyrkan utövar krafter på och tillför energi till elektronerna. Det hela förklaras med att ljuset avger energi till elektronerna i form av kvanta. Den monokromatiska elektromagnetiska vågen kan ses som en ström av partiklar, fotoner, med bestämd energi och rörelsemängd. För en plan våg av typen

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (12)$$

gäller för fotonen att energin och rörelsemängden är

$$E = \hbar\omega; \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \hbar(2\pi/\lambda)\hat{k}. \quad (13)$$

Vid den fotoelektriska effekten absorberas en foton när en elektron emitteras. När man ökar intensiteten ökar man antalet fotoner i vågen och sannolikheten för elektronemission, och därmed ökar fotoströmmen. För metaller och för de flesta andra material så finns en minsta energi, utträdesarbetet, som måste tillföras en elektron för att få ut den ur materialet. Därför kommer det inte ut några elektroner om fotonenergin är för liten oavsett hur stor intensiteten är hos vågen.

## Paulis uteslutningsprincip

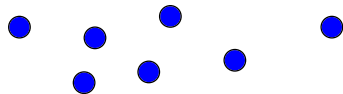
För att kunna beskriva hur elektronerna fördelar sig i material måste vi diskutera ytterligare kvantmekaniska effekter för identiska eller icke särskiljbara partiklar. Jag ska inte tränga djupare än nödvändigt utan bara kort beskriva dessa effekter. Om vi har en samling makroskopiska föremål, t.ex. studenter, framför oss kan vi se skillnad på dem och skilja dem från varandra. Om vi däremot har en samling elektroner framför oss kan vi inte skilja dem från varandra. De är identiska. Om vi byter plats mellan två av dem har vi inte ändrat någonting alls i fysiken hos systemet. Alla egenskaper är oförändrade. Vi kan konstruera en vågfunktion där variablerna innehåller alla variabler för alla elektronerna. Det är ju inte vågfunktionen som bestämmer de fysikaliska egenskaperna hos systemet, det är absolutbeloppet av vågfunktionen i kvadrat. Det ändras inte när vi byter plats på två av elektronerna. Vågfunktionen kan dock ändras men om vi byter plats på samma elektronpar igen är vi ju tillbaka till exakt samma situation som vi startade från. Nu måste vågfunktionen åter vara den ursprungliga.

Det finns endast två möjligheter: Antingen ändras inte vågfunktionen alls när man byter plats på två identiska partiklar; eller byter vågfunktionen tecken. Det innebär att det finns två typer av identiska partiklar. Man kallar dem bosoner och fermioner. Elektronen är en fermion. För fermioner gäller att vågfunktionen byter tecken då man byter plats på två av partiklarna. Det får en mycket viktig följd. Om två fermioner besätter samma tillstånd och man byter ut dem mot varandra har ju inget alls hänt. Vågfunktionen ska byta tecken men samtidigt inte ändras alls. Den enda möjligheten är att vågfunktionen är noll dvs. två fermioner kan inte finnas i samma tillstånd. Sannolikheten för detta är noll. Detta kallas Paulis uteslutningsprincip.

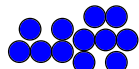
Ett elektrontillstånd kan karakteriseras av vågvektorn  $\mathbf{k}$ ; alternativt positionsvektorn  $\mathbf{r}$ . Nu tillkommer en komplikation: elektronen har också ett spinn, som kan anta två värden, spinn upp eller spinn ned. Detta innebär att högst två elektroner kan ha samma vågvektor. Det innebär också att två elektroner med samma spinn inte kan finnas i samma punkt i rummet samtidigt.

### 3. Materiens uppbyggnad

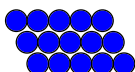
Man brukar dela in materien i fyra grupper eller tillstånd: gas, vätska, fast kropp och plasma. En gas består av fria atomer eller molekyler.



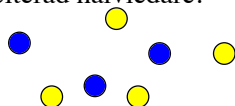
I en vätska är atomerna svagt bundna till varandra; de är i kontakt med varandra men kan röra sig; de bildar ingen stel struktur.



I ett fast ämne har atomerna fixa positioner; de bildar ofta en periodisk kristallstruktur. Atomtäteten är inte dramatiskt större än hos en vätska.



Ett plasma består av laddade partiklar. Det kan vara joner som i t.ex. jonosfären eller i lysrör; det kan vara elektroner och hål i en starkt exciterad halvledare.



När atomerna är långt ifrån varandra som i en gas utgör de oberoende enheter; elektronerna håller sig kvar i respektive atom; varje atom eller molekyl reagerar självständigt på ett elektromagnetiskt fält. Vi ska nu diskutera vad som händer när vi för ihop atomerna till en vätska eller ett fast ämne. Först måste vi behandla atomerna lite noggrannare än man gör i Bohrs atommodell.

I en fullständig kvantmekanisk beräkning är vågfunktionen för det lägsta energitillståndet i väteatomen, grundtillståndet:

$$\psi(r) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-r}{a_0}\right), \quad (14)$$

och sannolikhetstätheten är

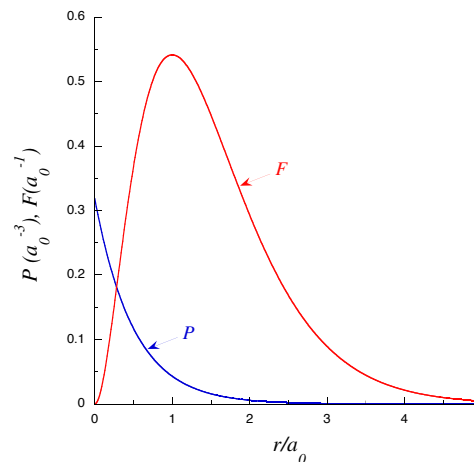
$$P(r) = |\psi(r)|^2 = \psi(r)^2 = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right); \quad (15)$$

$$\int_0^{\infty} dr 4\pi r^2 P(r) = 1.$$

Låt oss också införa  $F(r)$ , sannolikheten att finna elektronen på avstånd  $r$  från kärnan,

$$F(r) = 4\pi r^2 P(r) = 4\pi r^2 \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right); \quad (16)$$

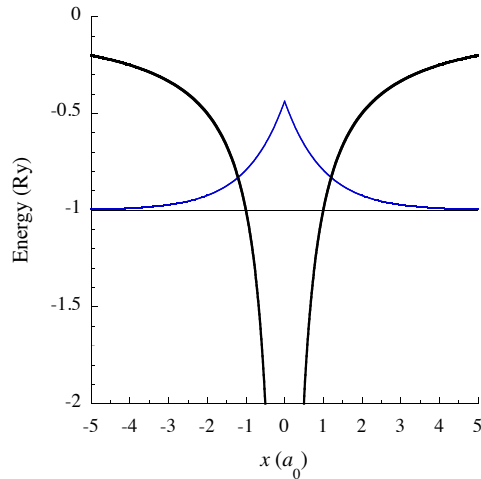
$$\int_0^{\infty} dr F(r) = 1.$$



**Figur 6: Sannolikhetstätheten,  $P$ , för att finna en elektron i väteatomens grundtillstånd. Funktionen  $F$  representerar sannolikheten att finna elektronen på avståndet  $r$  från atomkärnan.**

Vi ser i Figur 6 att det är störst sannolikhet att finna elektronen på avståndet Bohrradien från kärnan. Det är precis vad vi fick med den enkla Bohrmodellen. Potentialen som elektronen i väteatomen upplever ser ut som i Figur 7 utmed en linje genom väteatomens cen-

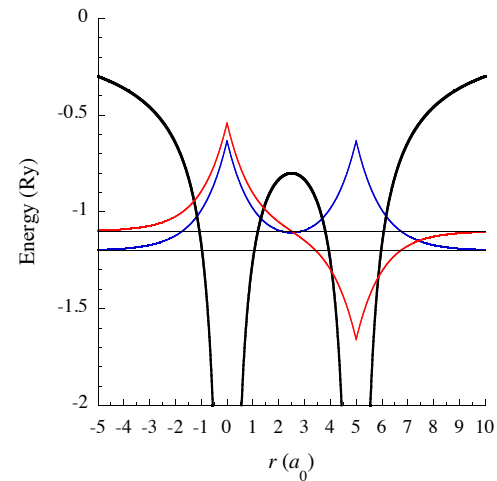
trum. Här är också vågfunktionen för grundtillståndet inritad med nollnivå vald att vara energin hos grundtillståndet.



**Figur 7: Potentialen och vågfunktionen för grundtillståndet hos en väteatom.**

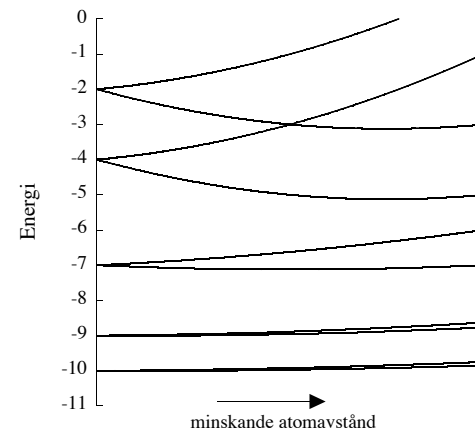
Nu för vi samman två väteatomer. När de är långt ifrån varandra finns det en elektron i varje väteatom och de två vågfunktionerna ser ut som den i Figur 7, centrerade kring sina atomkärnor.

Energierna för de två tillstånden är lika. För vi dem närmare varandra så blir barriären som skiljer dem åt lägre och vågfunktionerna spjeller ut lite grand. Då sjunker den kinetiska energin något. När vi stänger in en partikel mer och mer ökar energin hos de tillåtna tillstånden. När vi minskar instängningen minskar energin. Om avståndet är tillräckligt litet är vågfunktionerna inte längre begränsade till var sin atom utan sträcker sig genom båda.



**Figur 8: Potential och vågfunktioner i fallet två väteatomer nära varandra.**

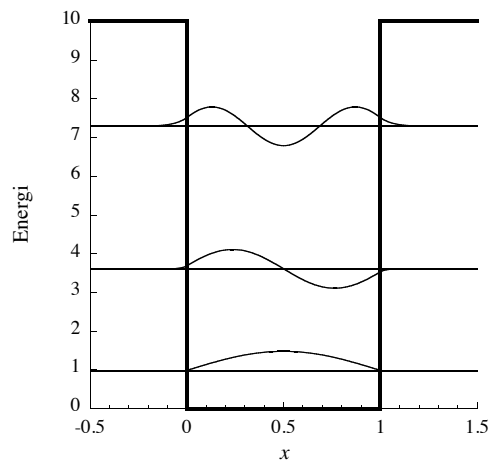
Resultatet är två vågfunktioner enligt Figur 8. Nivåerna splittras dessutom upp. För vi samman tre atomer får vi tre uppsplittrade nivåer osv. Nu har vi valt de enklaste av atomer. I andra atomer är flera nivåer besatta i grundtillståndet. Varje nivå splittras upp i det antal atomer vi har fört samman.



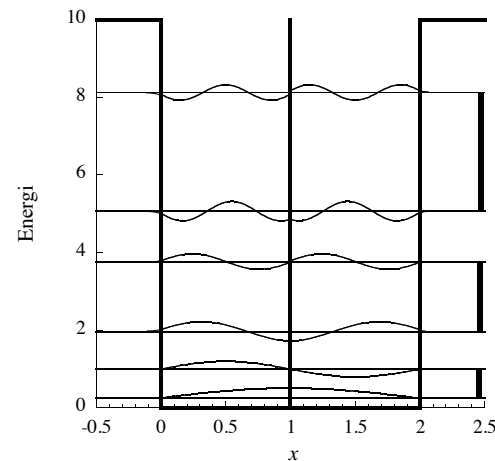
**Figur 9: Schematisk bild över hur energinivåerna breddas till band när man för ihop atomerna till en fast kropp eller vätska.**

I en  $\text{cm}^3$  av ett fast material finns det av storleksordningen  $10^{23}$  st. atomer. Det innebär att varje atomnivå splittras upp i  $10^{23}$  st. nivåer. Dessa bildar kontinuerliga band, energiband. Vissa band överlappar varandra men mellan vissa förblir det ett gap, ett bandgap. Energistillstånd som ligger djupt ned i potentialgroparna påverkas mycket lite av att vi har fört ihop atomerna och de resulterande banden har en försumbar bredd i energi. Dessa mycket smala band kallas core-nivåer. Om atomnivån är mycket grund kan det hända att de nya nivåerna hamnar ovanför barriärerna. De resulterar i valens- eller ledningsband.

Låt oss göra en alternativ betraktelse som kompletterar den tidigare. Vi börjar med partikeln i låda där nu väggarna inte längre är oändligt höga. Vi ser i Figur 10 att vågfunktionerna nu spiller ut utanför lådan. Effekten är störst ju längre upp nivån är. Djupt ned i potentialbrunnen är effekten mycket mindre. Vi ser också att energierna minskar. Våglängderna inuti brunnen ökar, och vågtalen minskar, då vågfunktionerna spiller ut. Vågfunktionerna inuti brunnen är fortfarande sinusfunktioner; utanför brunnen är vågfunktionerna exponentialfunktioner. På kanten av brunnen är både vågfunktionerna och dess derivator kontinuerliga.

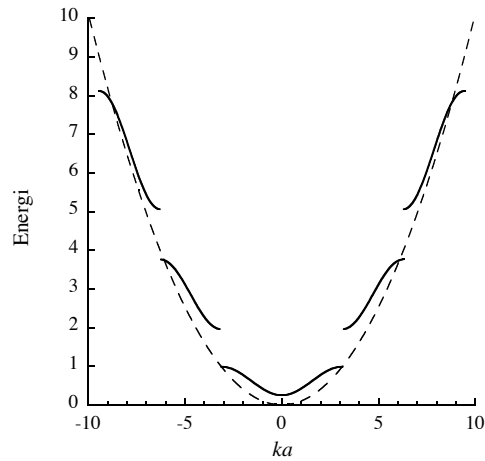


**Figur 10: Partikeln i låda med ändliga väggar.**



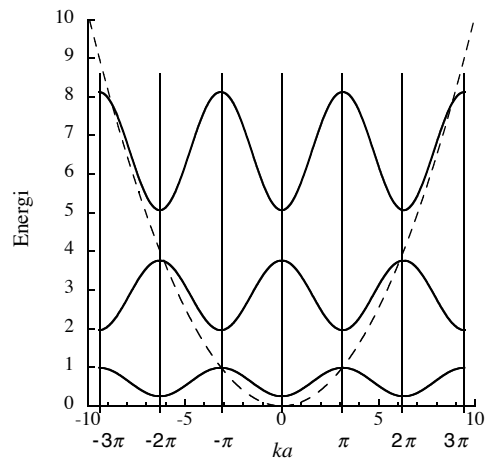
**Figur 11: Vågfunktioner i en dubbellåda.**

I Figur 11 ser vi vågfunktionerna i en dubbellåda. Varje nivå splittras upp i två. Hur stor uppsplittringen blir beror på hur hög barriären mellan lådorna är och hur bred. Om vi placerar ett mycket stort antal lådor bredvid varandra fylls området mellan varje par av splittrade nivåer ut med nivåer och de bildar ett kontinuum, ett band. Till höger i figuren indikeras de resulterande banden. Om barriärerna tas bort bildar hela strukturen en enda stor låda med ett enda kontinuumband av tillstånd. Energidispersionen (sambandet mellan energi och vågtal) för detta band representeras av den streckade kurvan i Figur 12.



**Figur 12: Samband mellan energi och vågtal för en elektron i en endimensionell periodisk potential.**

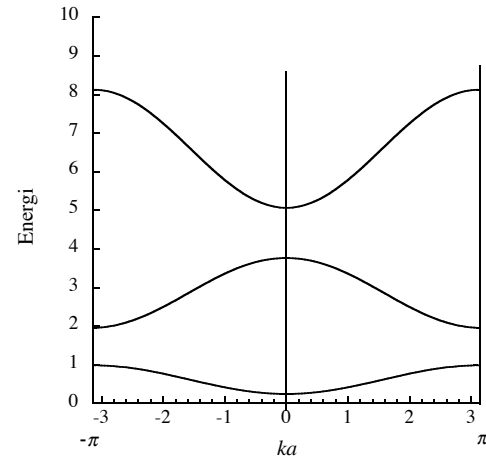
De heldragna kurvorna i figuren visar energidispersionen för banden när barriärerna är kvar. Vi ser att det uppstår gap i dispersionen för  $k = \pm n\pi/a$ ,  $n = 1, 2, 3 \dots$



**Figur 13: Energibanden i periodisk zonrepresentation**

Figur 12 är inte fullständig.  $E(k)$  kurvan upprepas periodiskt med perioden  $2\pi/a$  i hela  $k$ -rummet. Dispersionen är kontinuerlig med

flera grenar. Periodiciteten innebär att sambandet mellan  $E$  och  $k$  för ett godtyckligt  $k$ -värde kan bestämmas från kännedom om dess utseende för  $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ . Detta område i  $k$ -rummet kallas första Brillouin-zonen och området mellan  $-2\pi/a$  och  $-\pi/a$  samt mellan  $\pi/a$  och  $2\pi/a$  kallas andra Brillouin-zonen etc. Periodiciteten hos  $E(k)$ -funktionen medför att man alltid kan överföra en



**Figur 14: Energibanden i reducerade zonrepresentationen.**

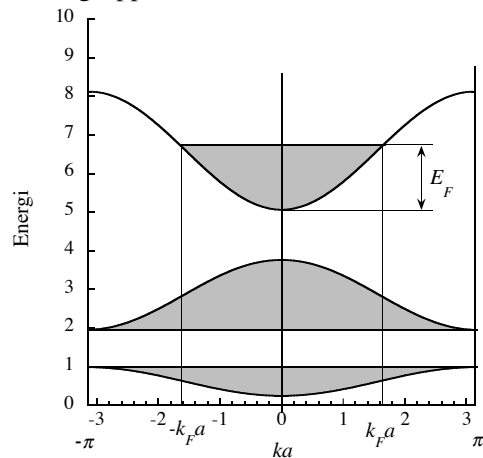
godtycklig vågvektor till första Brillouin-zonen och presenterar därför ofta sambandet mellan  $E$  och  $k$  endast inom denna zon, s.k. reducerad zonrepresentation, se Figur 14.

Vi har ju här bara studerat ett endimensionellt problem. En verklig kristall är ju tredimensionell. Brillouin-zonen utgör ett tredimensionellt område i  $k$ -rummet. Dess geometriska utseende beror på hur kristallstrukturen ser ut. I den enkla kubiska strukturen blir den en kub men för andra strukturer får den en annan form. Vi ska inte gå in på det närmare här.

En enhetscell i en kristallstruktur är den minsta enheten som upprepas periodiskt. Enhetscellen kan innehålla mer än en atom. Varje band i första Brillouin-zonen innehåller så många tillstånd som två gånger totala antalet enhetsceller i kristallen.

## 4. Elektrisk ledningsförmåga i fasta kroppar

Ur elektrisk ledningssynpunkt delas fasta kroppar in, i huvudsak, i de tre grupperna ledare (eller metall) halvledare och isolator.

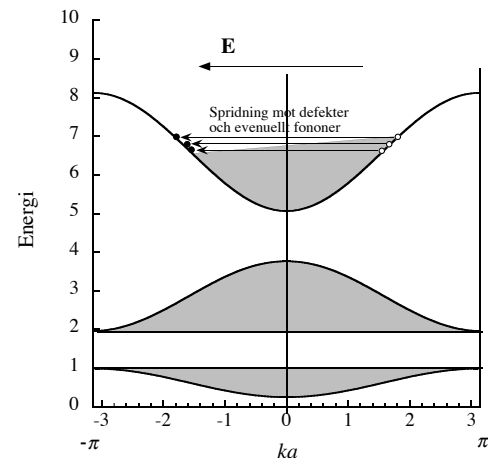


Figur 15: Bandstruktur för en metall.

För att karakterisera ett elektrontillstånd när vi använder den reducerade zonrepresentationen har vi tre parametrar, kvanttal: vilket band elektronen är i, vågvektorn och spinnet. Spinnet kan anta två värden. Enligt Paulis uteslutningsprincip kan vi ha högst två elektroner med samma vågvektor och bandnummer. Om det finns ett udda antal elektroner i enhetscellen i kristallen så fyller vi ett antal band helt och det översta blir halvfyllt. Då har vi en metall, se Figur 15. I en metall är elektrontillstånden fyllda upp till Fermi-nivån. I  $k$ -rummet bildar de ockuperade tillstånden en sfär, Fermisfären. Vid ändlig temperatur och termisk jämvikt är elektrontillstånden besatta enligt fördelningsfunktionen

$$n(E) = [\exp \beta(E - \mu) + 1]^{-1}, \quad (17)$$

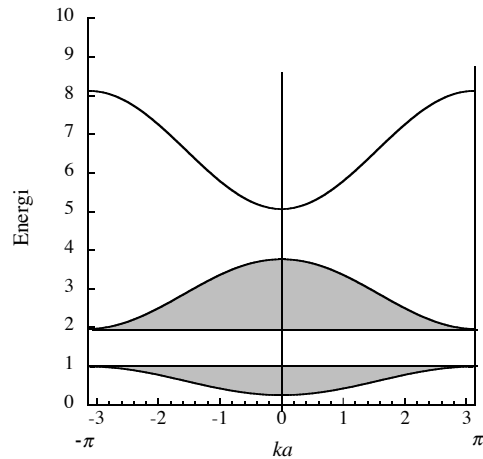
där  $\beta = 1/k_B T$  och  $\mu$  är kemiska potentialen, en parameter som ser till att antalet elektroner är bevarat och det rätta.



Figur 16: Elektronfördelning i närvaro av elektriskt fält.

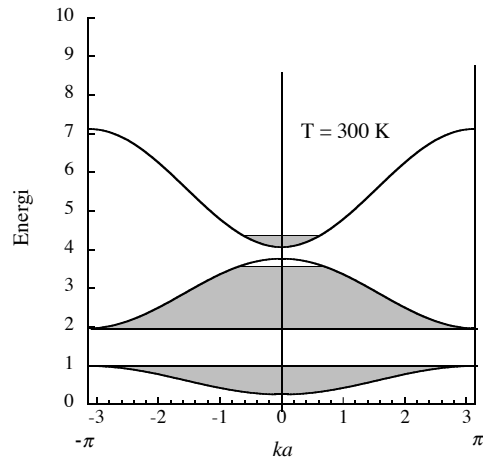
I närvaro av ett statiskt elektriskt fält i en metall börjar elektronerna driva i en riktning motsatt den som elektriska fältet pekar i, se Figur 16. Elektronerna accelereras och strömmen ökar. I  $k$ -rummet förskjuts Fermisfären stelt. Ju mer den förskjuts ju mer ökar möjligheten för elastisk spridning mot defekter i kristallen. Elastisk spridning innebär att elektronens energi inte ändras. En elektron kan pga. Paulis uteslutningsprincip inte spridas till ett tillstånd som redan är besatt. När Fermisfären förskjuts så ökar möjligheterna. Det inträder ett stationärt tillstånd då fältet ökar rörelsemängden för elektronerna med samma takt som bakåtspridningen mot defekter minskar den. Detta bestämmer sambandet mellan strömtätheten och fältstyrkan, dvs. konduktiviteten.

Om vi har ett jämnt antal elektroner i enhetscellen fyller vi ett antal band helt. Resultatet blir då en halvledare eller isolator. Det är ingen principiell skillnad mellan isolatorer och halvledare; det är storleken på bandgapet som skiljer de ockuperade, eller besatta, tillstånden från det närmast ockuperade, eller obesatta, tillståndet som bestämmer vilket. Om gapet är ungefär 1 eV eller mindre är det en halvledare annars en isolator, se Figur 17 och Figur 18. Vid rumstemperatur finns det lite termiskt exciterade elektroner i ledningsbandet och motsvarande hål i valensbandet i en halvledare. I isolatorfallet är antalet av dessa helt försumbart; det finns ingen



Figur 17: Bandstruktur för en isolator.

Fermifär och ingen ström flyter när ett statiskt elektriskt fält läggs på. I halvledarefallet har vi två Fermifärer, en i ledningsbandet med elektroner och en i valensbandet med hål. Hålen kan betraktas som partiklar med positiv laddning och negativ massa. Båda laddningsbärartyperna bidrar till strömmen och samverkar, men strömmen är mycket mindre än i en metall på grund av att antalet laddningsbärare är mycket färre.



Figur 18: Bandstruktur för en halvledare.

Vid mycket låg temperatur är det endast metaller som leder ström. I både halvledare och isolatorer är koncentrationen av laddningsbärare så pass låg att strömmen blir försumbar. Det som begränsar strömmen i en metall är spridning mot defekter och föroreningar i metallen. Dessa spridningar är elastiska. Med detta menar man att energin hos laddningsbäraren är oförändrad efter kollisionen med defekten. En annan möjlig spridningskälla är fononer men dessa spridningsprocesser går mot noll då temperaturen går mot noll. När temperaturen är noll finns det inga fononer i materialet. En elektron skulle kunna sätta atomerna i vibration, dvs. excitera en fonon, men i processen är energin bevarad och då fononen har en positiv energi måste elektronen sänka sin energi i processen. Det kan den inte på grund av Paulis uteslutningsprincip. Den skulle behöva spridas till ett tillstånd med lägre energi, men dessa är alla upptagna. Om vi nu höjer temperaturen i metallen ökar spridningsmöjligheterna mot fononer på två sätt: dels finns det då fononer exciterade i metallen; de kan absorberas av elektronen som då vid spridningen ökar sin energi och hamnar i ett tillstånd med högre energi; dessa tillstånd är ju lediga. Dels är det inte längre en skarp skiljelinje mellan besatta och obesatta elektrontillstånd; det finns elektroner med energi högre än en del obesatta tillstånd vilket medför möjligheten att elektroner kan excitera fononer och själva hamna i obesatta tillstånd med lägre energi. Det här innebär att för en metall minskar ledningsförmågan med temperaturen. Fördelningsfunktionen för fononerna är

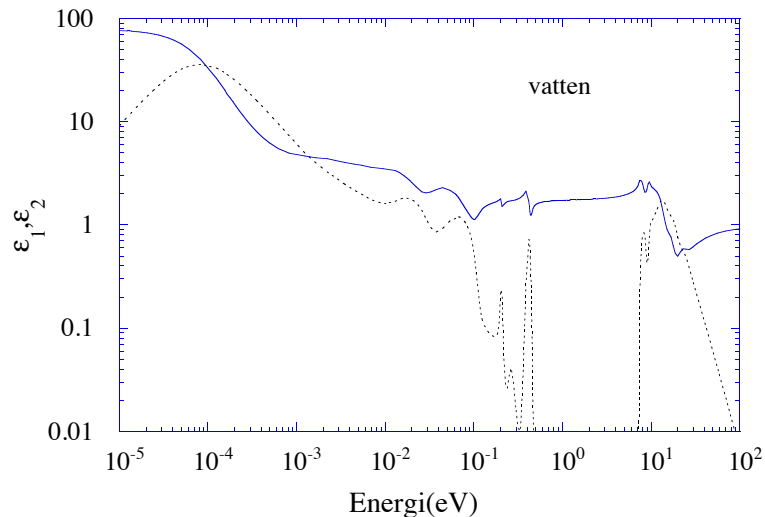
$$n(E) = [\exp[\beta E] - 1]^{-1}. \quad (18)$$

Funktionen gäller för masslösa bosoner, såsom fononer och fotoner.

För isolatorer och halvledare är det tvärt om; ledningsförmågan ökar med temperaturen. Anledningen är att antalet laddningsbärare ökar med temperaturen; utan laddningsbärare ingen ström! Elektroner exciteras termiskt över bandgapet. Det kommer att finnas två typer av laddningsbärare; elektroner i ledningsbandet och hål i valensbandet. Båda typerna av laddningsbärare bidrar till ledningsförmågan. Vi kommer att diskutera detta mera i detalj senare i kursen.

## Optiska excitationer

När en elektromagnetisk våg passerar genom ett material påverkas detta på olika sätt. I en gas kan rotationer av molekyler exciteras om molekylerna har intrinsiska dipolmoment. Man skiljer mellan intrinsiska och inducerade dipolmoment. Intrinsiska är sådana som finns där utan att ett yttre fält läggs på. Ett bra exempel är vattenånga. Vattenmolekylerna roterar i takt med det elektriska fältet. För att detta ska ske måste frekvensen av fältet vara i mikrovågsområdet eller lägre. Vid högre frekvens hinner inte molekylerna med i rotationen. Om gasen inte är enatomig utan består av molekyler kan vibrationer exciteras. Detta sker i det infraröda området och nedåt i frekvens. På samma sätt sker även här att om frekvensen är för hög hinner inte atomerna i molekylen med att vibrera. För alla gaser har man dessutom elektroniska excitationer, dvs. excitationer där elektroner förs upp från ett diskret tillstånd till ett med högre energi. Detta sker i det ultravioletta området.



**Figur 19: Realdelen (heldragen kurva) och imaginärdelen (prickad kurva) av vattnets dielektricitetsfunktion.**

För vätskor sker i princip samma sak som i gaser men allt blir lite breddat i energi eller frekvens. Atomerna eller molekylerna kan inte längre svara helt individuellt på fälten. Som exempel visar jag i Figur 19 dielektricitetsfunktionen för vatten. Dielektricitetsfunktionen är komplexvärd, dvs. har både en realdel och en imaginärdel. Absorptionen i ett material är proportionell mot imaginärdelen. Real- och imaginärdel är inte oberoende av varandra utan förenas genom de s.k. Kramers-Kronigs dispersionsrelationer:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\varepsilon_r(\omega) - 1] &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Im}[\varepsilon_r(\omega')] P \frac{\omega'}{(\omega')^2 - \omega^2}; \\ \operatorname{Im}[\varepsilon_r(\omega)] &= -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Re}[\varepsilon_r(\omega') - 1] P \frac{\omega}{(\omega')^2 - \omega^2}, \end{aligned} \quad (19)$$

där  $P$  betyder principalvärdet. Motsvarande relationer gäller för den atomära eller molekylära polariserbarheten:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \alpha(\omega) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Im} \alpha(\omega') P \frac{\omega'}{(\omega')^2 - \omega^2}; \\ \operatorname{Im} \alpha(\omega) &= -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Re} \alpha(\omega') P \frac{\omega}{(\omega')^2 - \omega^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Detta innebär att om man känner t.ex. imaginärdelen för alla frekvenser så kan man räkna ut realdelen för en godtycklig frekvens.

Vi ser att det för vatten finns ett område där det knappast finns någon absorption alls. Det synliga området ligger där. Därför uppfattar vi vattnet som transparent. Ovanför detta transparenta område finns elektroniska excitationer; dels inom de individuella atomerna; dels inom de individuella molekylerna; dels interbandexcitationer mellan energiband som har bildats när atomerna har kommit så nära varandra att atomnivåerna har breddats till band. Längre ned i energi kommer först en serie smala toppar. Dessa kommer från vibrationsnivåer. De två översta är breddade absorptionslinjer från vibrationsmoder i vattenmolekylen. Dessa illustreras i Figur 21 nedan.

I fasta ämnen är det något annorlunda. I vissa kristaller är mole-

kylerna förhindrade att rotera. Bindningar mellan grannatomer kan ha uppstått. I is kan fortfarande vattenmolekylerna rotera. Vibrationer är inte längre begränsade till molekylerna utan vibrationsmoderna sträcker sig över hela kristallen. De kallas fononer. Elektroniska excitationer sker här mellan energiband och inte mellan tillstånd i enskilda atomer.

## Rotationer

I en gas kan dielektricitetsfunktionen skrivas som

$$\varepsilon(0) = 1 + 4\pi n\alpha^{mol}, \quad (21)$$

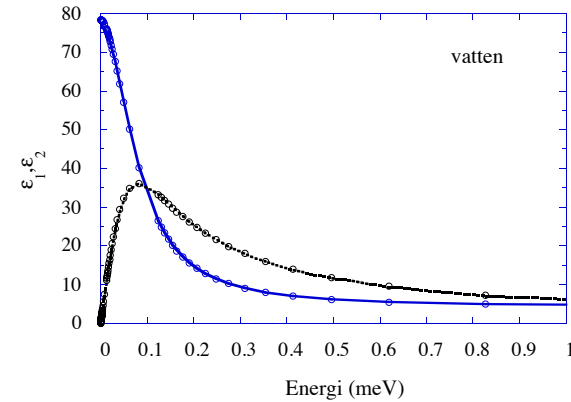
där den molekylära polariserbarheten har bidrag från rotationer, vibrationer och elektroniska excitationer. För enatomära gaser har vi endast elektroniska excitationer. Vi är här intresserade av rotationsområdet. De andra excitationerna sker vid högre energi och bidrar endast med en konstant till polariserbarheten i mikrovågsområdet. Enligt Debyes teori för rotationsrelaxation kan polariserbarheten skrivas som

$$\alpha(\omega) = \frac{C_{rot}}{1 - i\omega/\omega_{rot}}; \quad \omega_{rot}^{-1} = 4\pi\beta\eta a^3 \quad (22)$$

De tre parametrarna  $\beta$ ,  $\eta$  och  $a$  är  $1/k_B T$ , viskositeten, respektive molekylens effektiva radie.

Ekvation (21) borde ju inte gälla fullt ut för vatten, men vi kontrollerar ändå hur pass bra det fungerar. Anpassningen enligt Ekvation (23) visas i Figur 20

$$\begin{cases} \varepsilon_1(\omega) = 4.35 + \frac{72.24}{1 + (\hbar\omega/8.27 \cdot 10^{-2} \text{ meV})^2} \\ \varepsilon_2(\omega) = \frac{72.24 \cdot (\hbar\omega/8.27 \cdot 10^{-2} \text{ meV})}{1 + (\hbar\omega/8.27 \cdot 10^{-2} \text{ meV})^2} \end{cases} \quad (23)$$

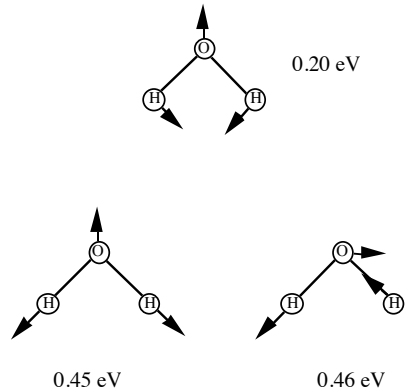


**Figur 20: Real- och imaginärdelen av vattnets dielektricitetsfunktion i mikrovågsområdet. Den heldragna (prickade) kurvan är den teoretiska anpassningen för realdelen (imaginärdelen) enligt ekvation (23). Cirkelarna är de experimentella resultaten.**

Vi ser att den sammanlagda effekten av alla excitationsprocesser med högre frekvenser än mikrovågsområdet är konstanten 4.35. Hade vi inte haft bidragen från rotationer skulle detta vara den statistiska dielektricitetskonstanten. Nu är den ju i stället cirka 80. Vi finner att den numeriska anpassningen stämmer mycket bra överens med de experimentella resultaten. I teorin finns medtaget att det elektriska fältet får vattenmolekylerna att rotera i takt med fältet men att friktion med andra molekyler motverkar rotationen. Det är precis så här mikrovågsugnen fungerar. Mikrovågorna får vattenmolekylerna i maten att rotera, dessa gnider mot varandra och mot andra atomer i maten och får dessa att vibrera, dvs. temperaturen stiger. I is fås vattenmolekylerna att rotera av mikrovågsstrålningen men friktionen mot grannmolekyler är mycket svagare vilket förklarar varför mikrovågsugnen är mindre effektiv på att värma och smälta is än att värma upp vatten eller tinad mat.

## Vibrationer

Fria vattenmolekyler i en gas kan fås att vibrera. Vattenmolekylen har tre vibrationsmoder enligt Figur 21. I en gas av vattenmolekyler ger detta upphov till tre absorptionslinjer. Två av dessa kommer mycket tätt.



Figur 21: Olika vibrationsmoder hos vattenmolekyler.

I vatten överlever dessa excitationer men de blir breddade då molekylerna trängs med varandra. Vi finner två breddade absorptionslinjer i imaginärdelen av vattnets dielektricitetsfunktion precis nedanför det transparenta området i det synliga området, se Figur 19. Absorptionslinjerna för två sista vibrationsnivåerna har breddats till en.

## Elektroniska excitationer

Låt oss börja med att betrakta den atomära polariserbarheten. Imaginärdelen är proportionell mot absorptionen av elektromagnetisk strålning hos atomen. Vi har ju sett att elektrontillstånden bildar diskreta energinivåer. Vi vet också att för att flytta upp en elektron från en nivå till en annan krävs att den elektromagnetiska vågen har rätt frekvens så att fotonenergin är lika med energidifferensen mellan tillstånden. Detta innebär att imaginärdelen av polariserbar-

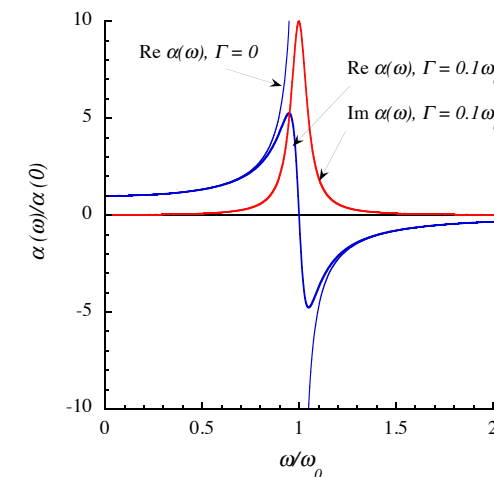
heten består av en serie deltafunktioner. Vi studerar bidraget från en sådan deltafunktion.

$$\begin{aligned} \text{Im } \alpha(\omega) &= \delta(\omega - \omega_0); \\ \text{Re } \alpha(\omega) &= \frac{2}{\pi} \frac{\omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Realdelen ovan följer ur Kramers-Kronigs dispersionsrelationer i ekvation (20). Av olika anledningar som jag inte går in på närmare här blir absorptionslinjerna breddade, och vi får

$$\begin{aligned} \text{Im } \alpha(\omega) &= \frac{2}{\pi} \frac{\omega_0 \omega \Gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega \Gamma)^2}; \\ \text{Re } \alpha(\omega) &= \frac{2}{\pi} \frac{\omega_0 (\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega \Gamma)^2}, \end{aligned} \quad (25)$$

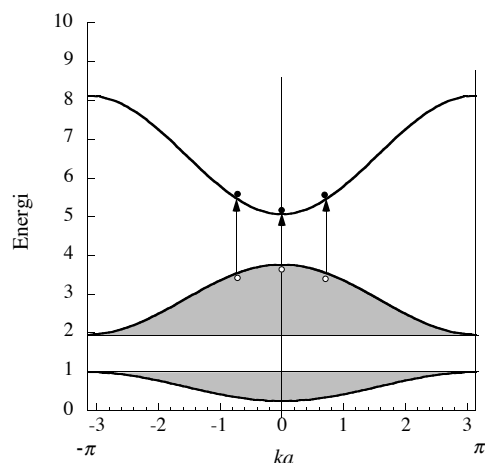
där  $\Gamma$  är en breddningsparameter. Resultaten utan breddning och med ett val av breddningsparameter visas i Figur 22.



Figur 22: Real- och imaginärdel av den atomära polariserbarheten vid en absorptionslinje. Resultat med och utan linjebreddning visas.

Vi kan identifiera flera liknande strukturer i dielektricitetsfunktionen för vatten. I ett statiskt elektriskt fält,  $\mathbf{E}$ , kommer atomerna att få ett inducerat dipolmoment i  $\mathbf{E}$ s riktning och med styrkan  $\alpha(0)\epsilon_0\mathbf{E}$ . Om vi ökar frekvensen ökar dipolmomentet i styrka, när ett maximum innan  $\omega_0$  nås, vänder nedåt och får en riktning motsatt den för fältet för att slutligen gå mot noll, se Figur 22. I området där polarisationen avtar med frekvens sker också absorption. Hela bilden påminner mycket om hur ett klassiskt mekaniskt system uppför sig kring en resonansfrekvens.

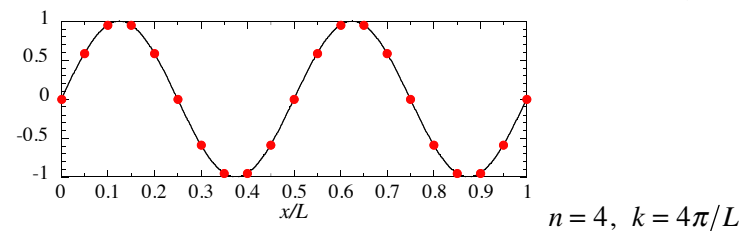
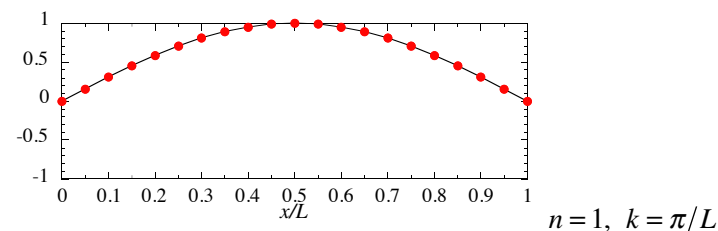
I en elektronisk excitation i ett fast material exciteras en elektron från ett fyllt tillstånd till ett tomt. Fotonens rörelsemängd är mycket liten jämfört med partiklarnas rörelsemängder. En övergång i ett bandstrukturdiagram är så gott som vertikal. I Figur 23 ser vi ett exempel på övergångar i en isolator eller halvledare. Vi ser att det finns en minsta möjliga energi för absorption. Den kallas optiska bandgapet.

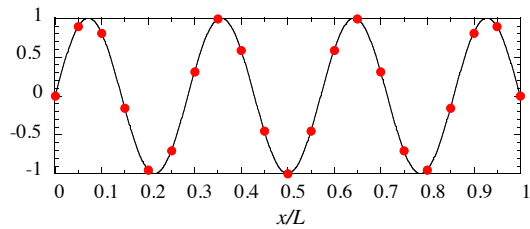


Figur 23: Optisk excitation i en isolator.

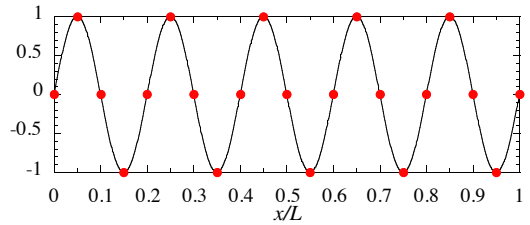
## Fononer

Fononer är kollektiva excitationer i fasta material där atomerna rör sig på ett kollektivt sätt. En våg rör sig genom materialet och atomernas förflyttning från sina jämviktslägen kan vara antingen i vågens utbredningsriktning eller vinkelrätt mot denna riktning. I det första fallet pratar man om longitudinella fononer och i det andra om transversella. Låt oss modellera fononer genom att studera en en-dimensionell kedja av 21 stycken atomer sammanbundna med sina närmaste grannar med fjädrar, alla med fjäderkonstanten  $k$ . Avståndet mellan atomerna är  $a$ . Vi börjar med att låta alla atomerna vara lika; detta motsvarar material med endast ett grundämne, t.ex. Si; varje enhetscell innehåller en atom och enhetscellens längd är  $a$ . Sedan upprepar vi modelleringen med varannan atom av en typ och varannan av en annan typ. Detta motsvarar material med två grundämnen, t.ex. GaAs; varje enhetscell innehåller två atomer och enhetscellens längd är  $2a$ . Vi väljer randvillkoren att ändpunktsatomerna är i fixa positioner och inte kan röra sig. Vi har alltså 19 rörliga atomer och förväntar oss att finna 19 olika moder. Jag visar ett urval av dessa här. På vertikala axeln visar jag förflyttningen av atomerna från dess jämviktsläge. Förflyttningen kan vara antingen i  $x$ -riktningen eller vinkelrätt mot den riktningen. Förflyttningen är mycket mindre än  $a$  så amplituden är starkt överdriven i figurerna.

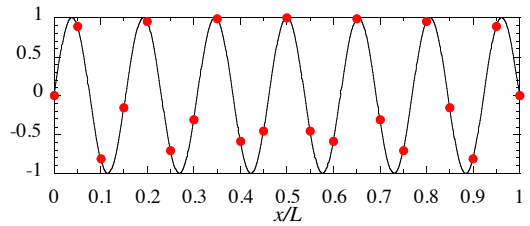




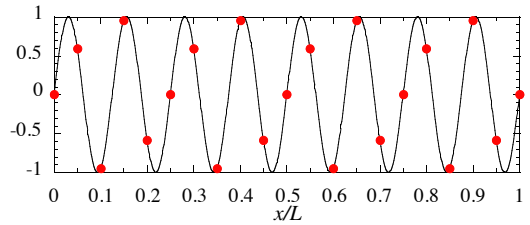
$n = 7, k = 7\pi/L$



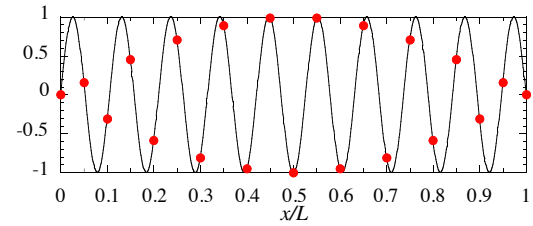
$n = 10, k = 10\pi/L$



$n = 13, k = 13\pi/L$



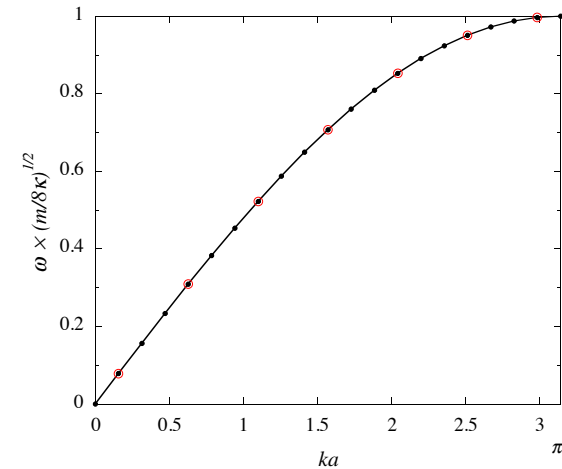
$n = 16, k = 16\pi/L$



$n = 19, k = 19\pi/L$

**Figur 24:** Sju av de nitton svängningsmoderna när alla atomer är av ett och samma atomslag.

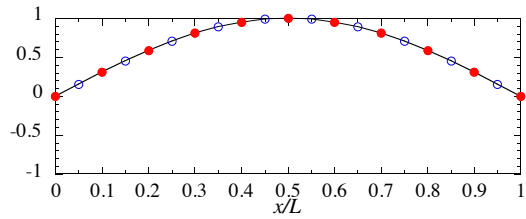
Dispersionskurvan för dessa fononer visas i Figur 25 under antagande att det är longitudinella varianten. De 7 moderna visade i figurerna ovan är markerade med cirklar. Det största  $k$ -värdet är  $\pi$  dividerat med längden på enhetscellen,  $a$ .



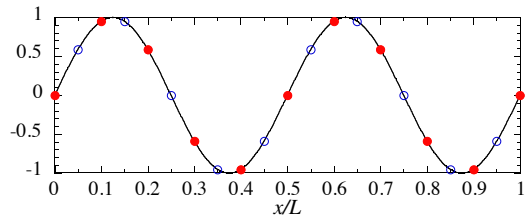
**Figur 25:** Dispersionskurvan för de 19 longitudinella fononmoderna. De sju moderna, beskrivna i figurerna ovan, är markerade med cirklar.

I Figur 24 visar jag ena ändläget för svängningen. Den fullständiga svängningen har förutom den rumsliga sinusfunktionen, enligt figuren, en tidsberoende sinusfunktion,  $\sin(\omega t)$ , där  $\omega$  för svängningsmoden anges i Figur 25. Den fullständiga svängningen beskrivs alltså av en funktion med formen  $A(x,t) = A_0 \sin(kx) \sin(\omega t)$ .

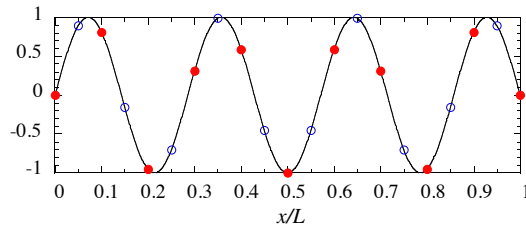
Nu upprepar vi det hela för fallet med två olika atomer.



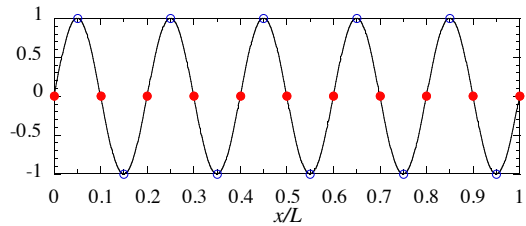
$$n = 1, k = \pi/L$$



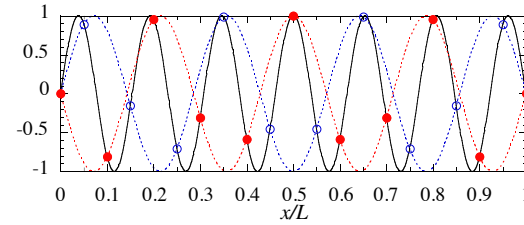
$$n = 4, k = 4\pi/L$$



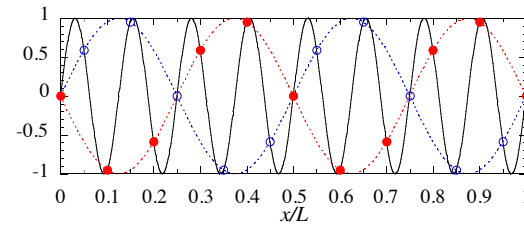
$$n = 7, k = 7\pi/L$$



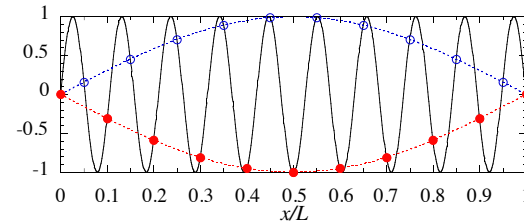
$$n = 10, k = 10\pi/L$$



$$n = 13, k = \begin{cases} 13\pi/L \\ 7\pi/L \end{cases}$$



$$n = 16, k = \begin{cases} 16\pi/L \\ 4\pi/L \end{cases}$$

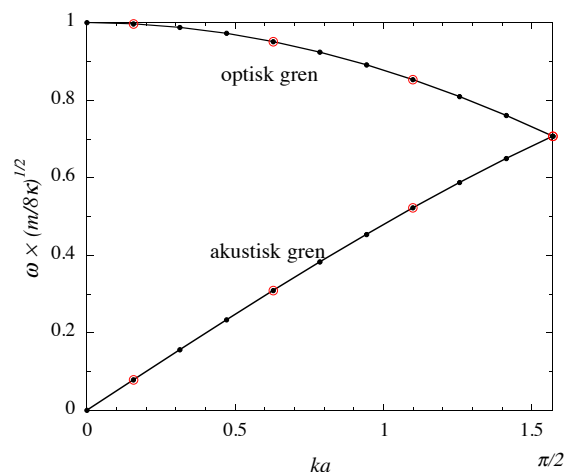


$$n = 19, k = \begin{cases} 19\pi/L \\ \pi/L \end{cases}$$

**Figur 26: Sju av de nittion svängningsmoderna vid två olika atomslag.**

Dispersionskurvan för dessa fononer visas i Figur 27 under antagandet att det är longitudinella varianten. De 7 moderna visade i figurerna ovan är markerade. Vi ser att åter igen är det största  $k$ -värdet  $\pi$  dividerat med längden på enhetscellen, som nu är  $2a$ . I de tre första svängningarna svänger de två atomslagen tillsammans; i de tre sista svänger de i motsatt riktning. Vi ser att för var och en av de sista gäller att alla atomer ligger på en gemensam sinuskurva men om man tittar på bara atomer av ett atomslag så ligger dessa även på en sinuskurva med längre våglängd. De två atomslagen svänger 180 grader ur fas med varandra.

De första tillhör den akustiska grenen medan de tre sista tillhör den optiska genen. Alla material har akustiska moder. Material där det finns mer än en atom per enhetscell har också optiska moder. Även material bestående av ett enda grundämne har optiska moder om enhetscellen innehåller fler än en atom men kopplingen till elektromagnetiska fält blir försumbar.



**Figur 27: Dispersionskurvan för de 19 longitudinella fononmoderna. De sju moderna beskrivna i figurerna ovan är markerade med cirklar. De tre första tillhör den akustiska grenen där de två atomslagen svänger i fas. De tre sista tillhör den optiska grenen där de två atomslagen svänger i motsatt riktning.**

Jag har här antagit att de två atomslagen har samma massa. Om man antar att de har olika massa uppstår det ett energigap vid Brillouin-zon-kanten.

I en jonisk isolator som NaCl är materialet uppbyggt av joner. I NaCl är dessa Na<sup>+</sup> och Cl<sup>-</sup>-joner. I en polär halvledare är atomerna inte joner men laddning har i varierande grad överförs från ett atomslag till det andra. Alla halvledare som består av fler än ett grundämne, såsom GaAs eller CdS, är polära. Halvledare som bara består av ett enda grundämne, såsom Si och Ge är inte polära. Det är ingen principiell skillnad mellan joniska isolatorer och polära halvledare. Skillnaden ligger i graden av laddningsöverföring från negativa till positiva atomer.

I ett material med två typer av grundämne kopplar de optiska moderna starkt till ljus. Det är därför moderna kallas för optiska. Varför kallas de akustiska då för akustiska? För långa våglängder, dvs. för små  $k$ -värden är dispersionen linjär. Det innebär att både fashastigheten,  $v_f = \omega/k$ , och grupphastigheten,  $v_g = d\omega/dk$ , är lika. De är lika med ljudhastigheten i materialet. Fononerna är ljudvågor, akustiska vågor i detta område. Om vi knackar i bordet exciterar vi akustiska fononer.

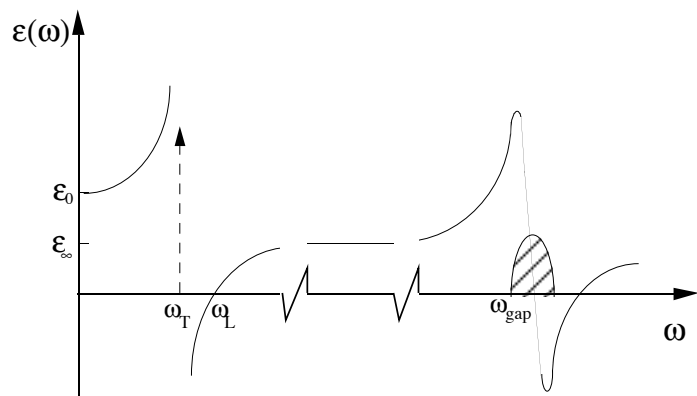
Vi bör notera att fononer, till skillnad från elektrontillstånd, bara existerar inom första Brillouin-zonen. Detta är på grund av att fononen karakteriseras av förflyttning av atomer från sina jämviktslägen, vilka har diskreta positioner. Förflyttningen är en funktion av diskreta variabler. Elektronernas vågfunktioner är funktioner av kontinuerliga variabler. (Jämför Fourierserietransformer kontra Fouriertransformer).

## 5. Dielektricitetsfunktionen

Jag går nu schematiskt igenom hur dielektricitetsfunktionen ser ut i olika fasta material. Jag börjar med halvledare och isolatorer och avslutar med metaller. Genomgående menar jag den relativa dielektricitetsfunktionen.

### Halvledare eller isolator

Eftersom elektromagnetiska vågor kopplar till de optiska fononerna bidrar dessa till dielektricitetsfunktionen för polära halvledare och joniska isolatorer. Dielektricitetsfunktionen för en polär halvledare eller jonisk isolator kan se ut som i Figur 28. Två absorptionsområden är angivna: för höga energier kan elektroner exciteras över bandgapet och vi har ett absorptionsband i det synliga eller ultravioletta området; för små energier kan transversella optiska fononer exciteras och vi har en absorptionslinje i det infraröda området. Givet imaginärdelen av dielektricitetsfunktionen följer realdelen från Kramers-Kronigs dispersionsrelationer, ekvation (19).



**Figur 28:** En schematisk bild av dielektricitetsfunktionen i en polär halvledare eller jonisk isolator. Breddningen av absorptionslinjen från de transversella optiska fononerna har försumrats. Imaginärdelen är då en deltafunktion vilken har markerats med en vertikal pil.

För höga energier, över det översta absorptionsbandet, är värdet ett; när energin närmar sig absorptionsbandet minskar värdet och blir negativt; det passerar ett minimum, passerar noll, passerar ett maximum och avtar utanför bandet; det närmar sig ett konstant värde,  $\epsilon_\infty$ , och skulle stanna vid detta värde om inte de optiska fononerna hade varit; nu minskar värdet igen när energin närmar sig absorptionslinjen, blir negativ och går mot minus oändligheten; det kommer tillbaka från plus oändligheten när absorptionslinjen har passerats, avtar och närmar sig ånyo ett konstant värde,  $\epsilon_0$ , när energin går mot noll. Detta värde är större än det konstanta värdet mellan absorptionslinjen och absorptionsbandet.

Varje gång funktionen passerar noll utanför ett absorptionsområde har vi en longitudinell excitation hos materialet. Jag har markerat den longitudinella optiska fononen i figuren. Ovanför absorptionsbandet har vi en longitudinell excitation till. Det är en plasmonmod. I denna excitation svänger de bundna elektronerna kollektivt fram och tillbaka med frekvensen för nollgenomgången. Man brukar förknippa plasmoner med metaller, men de finns även i halvledare och isolatorer. Vid en plasmonexcitation i en metall svänger de fria elektronerna kollektivt fram och tillbaka.

Vi kan identifiera flera allmänna beteenden hos realdelen av dielektricitetsfunktionen: Den är hela tiden monotont växande med energin i alla områden mellan absorptionsband eller absorptionslinjer; detta kallas normal dispersion. Inom absorptionsband kan man ha anomal dispersion, dvs. funktionen kan avta med energin. Mellan områdena med absorption närmar sig funktionen ett konstant värde. Dessa konstanta värden minskar med ökande energi. Den fysikaliska anledningen är att för frekvenser över de för ett givet absorptionsband hinner inte de processer som ger upphov till absorptionsbandet med att skärma fältet.

Att dielektricitetsfunktionen växer monotont mellan absorptionsband eller absorptionslinjer är t.ex. anledningen till att himlen är blå och solnedgången är röd. Ljus med högre energi, kortare våglängd, bryts mer i atmosfären än ljus med lägre energi, längre våglängd.

I frekvensområden där realdelen av dielektricitetsfunktionen är negativ går ingen våg fram genom materialet. I vårt exempel finns det två sådana områden. Dessa innebär förbjudna gap för elektromagnetiska vågor i materialet. Om vi skickar en elektromagnetisk våg med en energi i något av gapen mot ett föremål av detta material så totalreflekteras vågen.

## Metall

Dielektricitetsfunktionen för en metall kan approximativt skrivas som

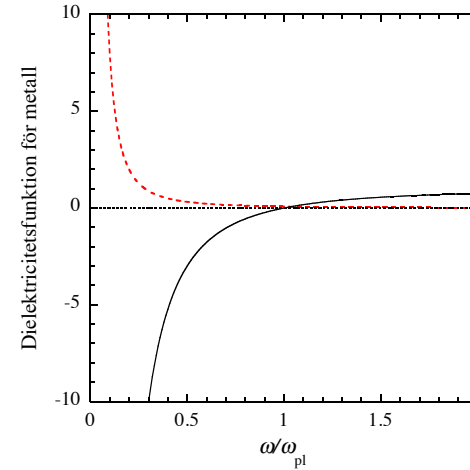
$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\omega), \quad (26)$$

där den dynamiska konduktiviteten är

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m(1/\tau - i\omega)} = \frac{1}{\rho_0 - i\omega m/ne^2} = \frac{1}{\rho_0 - i4\pi\omega/\omega_{pl}^2}, \quad (27)$$

där  $\rho_0$  och  $\omega_{pl}$  är resistiviteten respektive plasmafrekvensen. Låt oss nu specificera real- och imaginärdelarna. De är

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\omega) &= 1 - \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Im} \sigma(\omega) = 1 - \frac{4\pi}{\omega} \frac{4\pi\omega/\omega_{pl}^2}{\rho_0^2 + (4\pi\omega/\omega_{pl}^2)^2} \\ &= 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + (\rho_0\omega_{pl}^2/4\pi)^2}; \\ \varepsilon_2(\omega) &= \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Re} \sigma(\omega) = \frac{4\pi}{\omega} \frac{\rho_0}{\rho_0^2 + (4\pi\omega/\omega_{pl}^2)^2} \\ &= \frac{\omega_{pl}^4/4\pi}{\omega [\omega^2 + (\rho_0\omega_{pl}^2/4\pi)^2]}. \end{aligned} \quad (28)$$



**Figur 29: Real- (heldragen) och imaginärdel (streckad) av dielektricitetsfunktionen för en metall.**

Ett typexempel ges i Figur 29. Den streckade kurvan representerar imaginärdelen av dielektricitetsfunktionen. Den heldragna kurvan representerar realdelen. Denna utgår från värdet ett för mycket höga frekvenser, avtar med fallande frekvens och passerar noll vid plasmafrekvensen. Under plasmafrekvensen är den negativ. Det innebär att inga elektromagnetiska vågor med dessa frekvenser kan färdas genom materialet. Materialet är totalreflekterande under plasmafrekvensen. För frekvenser över plasmafrekvensen däremot kan elektromagnetiska vågor passera genom materialet.

## Några slutord

När en elektromagnetisk våg, med en frekvens som överensstämmer med en absorptionslinje eller finns inom ett absorptionsband, passerar genom ett material absorberas en del av vågens energi. I materialet har excitation skett så att atomer vibrerar eller roterar, fononer har skapats eller elektroner har lyfts upp till högre energinivåer. Om frekvensen ligger under absorptionslinjen eller absorptionsbandet sätts atomer eller elektroner tillfälligt i rörelse men när den elektromagnetiska vågen har passerat förbi fortgår inte rörelsen och ingen energi har absorberats.

### Uppgifter på materialuppbyggnad

#### m:1

Beräkna  $\mathbf{E}$ -fältet i sfäriska koordinater från en väteatom placerad i origo. Laddningarna som ger upphov till fältet är kärnan i origo plus elektronmolnet. Punktladdningen  $e$  är placerad i origo (kärnan). Laddningstätheten från elektronmolnet ges av

$$\rho(r) = \left( \frac{-e}{\pi a_0^3} \right) \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$$

#### m:2

Använd den halvklassiska Bohrmodellen för att beskriva väteatomen. Beräkna polariserbarheten för en väteatom genom att lägga på ett yttre elektriskt fält vinkelrätt mot den plana elektronbanan.

#### m:3

En elektron rör sig i ett område med konstant magnetisk flödestäthet,  $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$ . Vid tiden  $t = 0$  passerar den genom origo med hastigheten  $\mathbf{v} = (0, u, u)$ . Beskriv den fortsatta rörelsen hos elektronen, dvs. ange dess tidsberoende lägesvektor  $\mathbf{r} = (x(t), y(t), z(t))$

### Facit till uppgifter på materialuppbyggnad

$$\mathbf{m:1} \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \hat{r} \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2} \exp\left(\frac{-2r}{a_0}\right) \left( 2\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 + 2\left(\frac{r}{a_0}\right) + 1 \right)$$

$$\mathbf{m:2} \quad \alpha = 4\pi\epsilon_0 a_0^3 \quad (\text{En korrekt kvantmekanisk beräkning ger } \frac{9}{2} 4\pi\epsilon_0 a_0^3).$$

$$\mathbf{m:3} \quad \mathbf{r}(t) = \left( \frac{mu}{eB} \left( 1 - \cos\left(\frac{eB}{m} t\right) \right), \frac{mu}{eB} \sin\left(\frac{eB}{m} t\right), ut \right)$$