

Sammanfattn. från förra föreläsning.:

Elektroner i periodiska potential

Fria elektronmodellen:

{ vägtal  $\vec{k}$   
spinn

Periodiska potential

{ gitter vägtal  $\vec{k}$  1sta BZ  
bandindex  $n=1,2,3,\dots$   
spinn

Blochsteoren

Vägfkn.:  $\psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})\psi_{\vec{k}n}(\vec{r})$

↑ samma period som gittret

Tomma gittermodellen

Antag att potentialen  $U(\vec{r})$  är väldigt liten  $\approx 0$

↳ Då är energerna

$$E_{\vec{k}n} = \text{energin för fria elektroner} \quad \text{dvs} \quad \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2$$

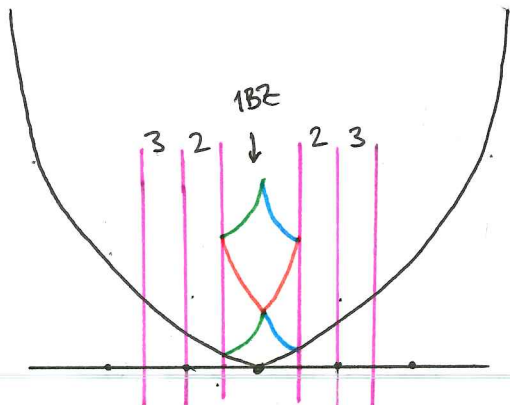
Ett sätt att uppskatta bandstruktur

kan funka för vissa enkla metaller!

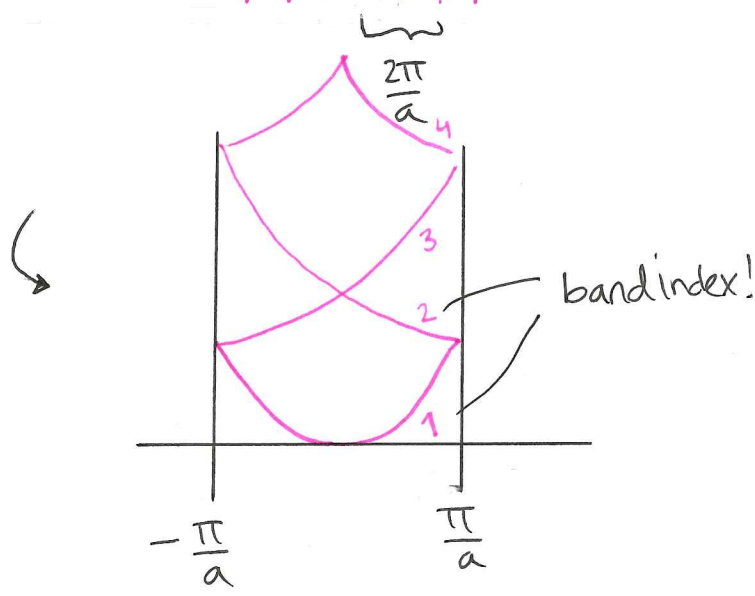
Ex.

1D gitter

• • • • • → reciprokt gitter med  $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}$  heltal  $\hat{x}$



Flytta in tillstånd utanför första BZ in i 1sta mha reciprokt gittervektor!



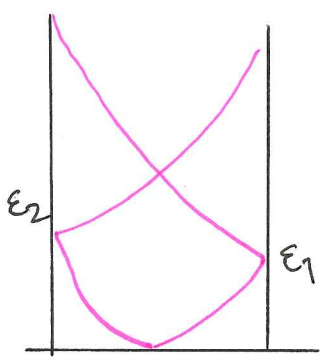
Bandstruktur för tomma gittermodellerna!

Lägg till svag potential  $U \geq 0$

$$U \ll \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

karaktäristisk energi

{ spelar bara roll om två energier är nästan samma! }



$E_2 \approx E_1 \rightarrow$  nya energier genom att lösa

$$\begin{bmatrix} E_1 - E & U \\ U & E_2 - E \end{bmatrix} \rightarrow \det \begin{bmatrix} \phantom{E_1 - E} & \phantom{U} \\ \phantom{U} & \phantom{E_2 - E} \end{bmatrix} = 0$$

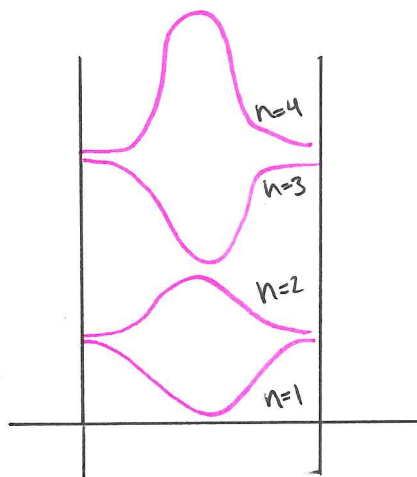
nya energier  $E$

$$(E_1 - E)(E_2 - E) - U^2 = 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{antag} \\ E_1 = E_2 \end{array} \right\} \rightarrow$$

$$E_1^2 - 2EE_1 + E_1^2 - U^2 = 0 \rightarrow E = E_1 \pm \sqrt{E_1^2 + (U^2 - E_1^2)}$$

$$= E_1 \pm U$$

# Bandstruktur: Nästan frielektronmodell



ish....

**Isolator:** Har fyllda band

**Metall:** band som inte är fulla  
 ^  
 något/några

(kan ha vissa som är fulla)

**Halvledare:** isolator med litet gap

Antal tillstånd i ett band

↳ ett band: har ett tillstånd för  $\vec{k}$ -tillstånd  
 i första BZ  $\times 2$  för spin

↳ Antal tillstånd i 1BZ:  $N_{BZ} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot V_{BZ}$

↑  
 tillståndstätt  
 i  $k$ -rummet

↑  
 volym i  
 $k$ -rummet

$$V_{BZ} = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = \left\{ \begin{array}{l} \text{kan visas} \\ \text{generellt} \end{array} \right\}$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{V_{cell}}$$

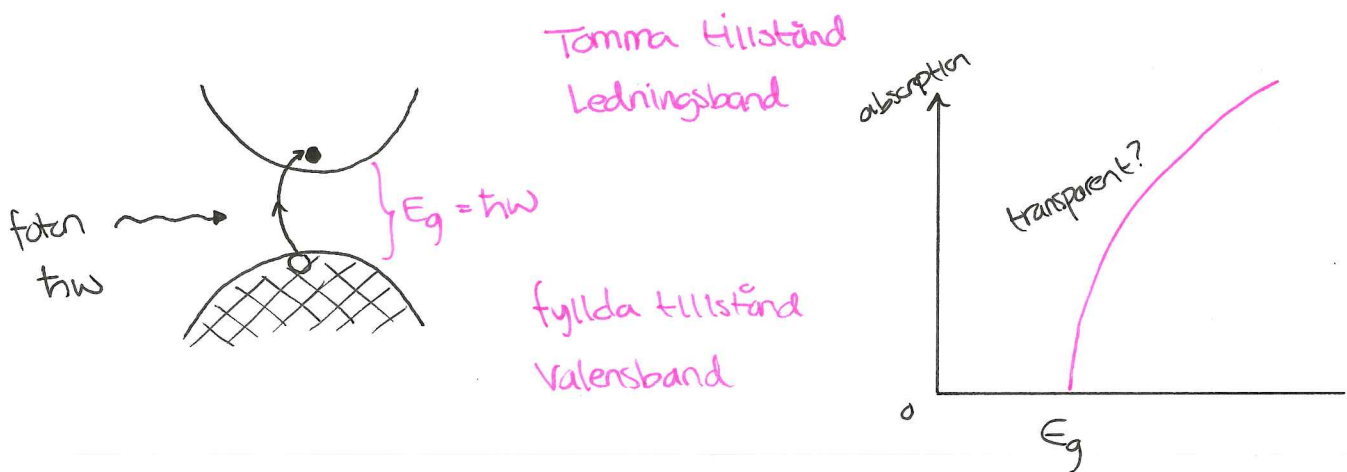
Ex. enkel kubiskt med sidlängd  $a \Rightarrow V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V_{cell}}$

→  $N_{BZ} = \frac{V}{V_{cell}} = N_{cell}$  antal primitiva celler

→ 1 band får det plats  $2N_{cell}$  elektroner

↳ För isolatorer krävs ett jämt antal elektroner per cell!

Hur kan man se bandgapet för en isolator?



{ om  $E_g < h\nu$  kan ljus absorberas  
 $E_g > h\nu$  — " — inte absorberas

Är ljuset helt opåverkat för  $h\nu < E_g$ ? Nej!

Brytningsindex!

Elektromagnetisk respons

AC-fält  $E \sim \exp(-i\omega t)$

{ Förenklad  
beskrivning }

Vågekv. för ljus (från Maxwell)

$$\nabla^2 \vec{E} - \left(\frac{n}{c}\right)^2 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{inga strömmar})$$

$n$ -brytn. index  $n = \sqrt{\epsilon_r}$  där  $\epsilon_r$  - dielektricitetsfkn.

Ljushast.  $v = \frac{c}{n}$

$\epsilon_r$  från polarisation av materialet

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$$


↑ elektriskt susceptibel

$$\epsilon_r = 1 + \chi_e$$

Modell för att beräkna  $\vec{P}$  givet  $\vec{E}$

$$\vec{P} = n \vec{p}$$

↑ elektron-täthet  
↑ dipolmoment för 1 elektron

Dipolmoment: 

Krafter:

Fjäder:  $-m\omega_0^2 x$

Fält:  $-eE \sim \exp(-i\omega t)$

Dämpning:  $-m \frac{\dot{x}}{\tau}$

$$BE: m\ddot{x} = -m\omega_0^2 x - m \frac{\dot{x}}{\tau} - eE$$

Lösn.  $x \sim \exp(-i\omega t)$  samma frekvens som fältet!

$$\Rightarrow -m\omega^2 x = -m\omega_0^2 x + i\omega m \frac{x}{\tau} - eE$$

$$x = \frac{-eE}{-m(\omega^2 - \omega_0^2 + i\frac{\omega}{\tau})}$$

$$\Rightarrow p = -ex = \frac{e^2 E}{+m(\omega^2 - \omega_0^2 - i\frac{\omega}{\tau})}$$

$$P = np, \quad \epsilon_r = 1 + \frac{P}{\epsilon_0 E}$$

