

## a) BCC

För en BCC med kantlängd  $a$  ges de primitiva translationsvektorer av  $\frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ ,  $\frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$  och  $\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ .

Det reciproka gittret blir en FCC med reciproka gittervektorer  $\frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z})$ ,  $\frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z})$  och  $\frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$ , vilket är en FCC med enhetscellens sida  $2 \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{4\pi}{a}$ .

Motsvarande Brillouinzon för BCC har närmaste sidan i punkten  $\frac{\pi}{a}(1, 1, 0)$  (Physics handbook T 7.2).

För att Fermisfären ska tangera sidan av Brillouin-zonen krävs därför att  $k_F = \left| \frac{\pi}{a}(1, 1, 0) \right| = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}$

Sambanden  $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$  och  $n = \frac{N}{V} = \frac{n_0 \cdot N_{\text{cell}}}{V_{\text{cell}}}$ , där  $n_0 = \#$  valenselektroner/atom och  $N_{\text{cell}} = \#$  atomer/cell, ger

$$n_0 = \frac{k_F^3 a^3}{3\pi^2 \cdot N_{\text{cell}}} = \frac{\pi^3 \cdot 2^{3/2} \cdot a^3}{a^3 \cdot 3\pi^2 \cdot N_{\text{cell}}} = \left\{ N_{\text{cell}} = 2 \text{ för BCC} \right\} =$$

$$= \frac{\pi \cdot 2^{3/2}}{3 \cdot 2} = \underline{1,48} \text{ valenselektroner/atom.}$$

b) För en FCC med kantlängd  $a$  är reciproka gittret en BCC med enhetscells-sidlängd  $\frac{4\pi}{a}$ . Närmaste sidan i Brillouin zonen ligger i  $\frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$ . (Physics handbook T.7.2).

$$\Rightarrow k_F = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}$$

$$\Rightarrow n_0 = \frac{k_F^3 a^3}{3\pi^2 N_{\text{cell}}} = \frac{3^{3/2} \pi^3 a^3}{a^3 \cdot 3\pi^2 N_{\text{cell}}} = \left\{ N_{\text{cell}} = 4 \text{ för FCC} \right\} =$$

$$= \frac{\sqrt{3}\pi}{4} = \underline{1,36} \text{ valenselektroner/atom.}$$

EF2 Kanten av första Brillouin-zonen i  $[111]$ -riktningen

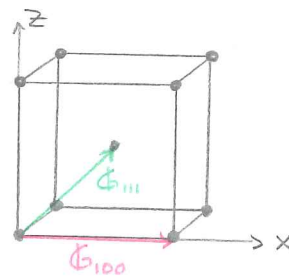
ligger i  $\frac{\pi}{a}(1,1,1)$ . Energin för elektroner med en vågvektor som ligger i  $[111]$ -riktning kan skrivas

$$E_{hkl}(k_{111}) = \frac{\hbar^2}{2m} |k_{111} - G_{hkl}|^2, \quad \text{där } k_{111} \in 1. \text{ BZ} \quad \text{och } G_{hkl}$$

är en reciprok gittervektor som translaterar banden till 1. BZ i  $[111]$ -riktning.

De lägsta banden fås för de kortaste  $G_{hkl}$ -vektorerna. De kortaste reciproka gittervektorerna för FCC, som är BCC i reciproka rummet, är:

1.  $G_{000}$
2.  $G_{111}, G_{-111}, G_{-1-1-1}$  och  $G_{1-1-1}$
3.  $G_{200}, G_{-200}$



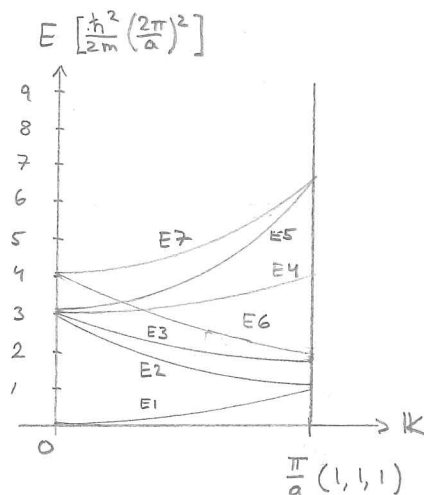
: o.s.v (Vissa band är flerfaldigt genererade på grund av symmetri.)

Genom att parametrisera  $k_{111} = q \cdot \frac{2\pi}{a}$ ,  $q \in [0, \frac{1}{2}]$ , kan vi skriva

$$E_{hkl}(k_{111}) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left| \frac{2\pi}{a} \cdot q - \frac{2\pi}{a} (h, k, l) \right|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \left( (q-h)^2 + (q-k)^2 + (q-l)^2 \right)$$

Studera resultaten för  $E_{hkl}$  för stigande  $hkl$  och plotta:

$hkl$	$E_n$
000	$E_1 = 3E_0 q^2$
111	$E_2 = 3E_0 (q-1)^2$
-111	$E_3 = E_0 (2(q-1)^2 + (q+1)^2)$
-1-1-1	$E_4 = E_0 ((q-1)^2 + 2(q+1)^2)$
-1-1-1	$E_5 = 3E_0 (q+1)^2$
200	$E_6 = E_0 ((q-2)^2 + 2q^2)$
-200	$E_7 = E_0 ((q+2)^2 + 2q^2)$



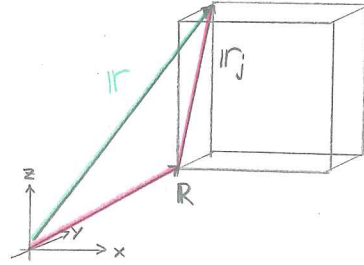
EFG

Bandgapet  $E_g = 2 U(\frac{\pi}{a})$

Elektronerna rör sig i en periodisk potential där potentialen  $U$  i varje punkt  $\mathbf{r}$  ges av:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_j \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{R} + \mathbf{r}_j))$$

där  $\mathbf{R}$  går över alla celler i kristallen, och  $j$  går över alla atomer i cellen.



Utveckla  $U(\mathbf{r})$  i en Fourier serie  $U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} U(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

Physics handbook: M12

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{i \frac{k\pi}{L} x}, \quad c_k = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-i \frac{k\pi}{L} x} dx$$

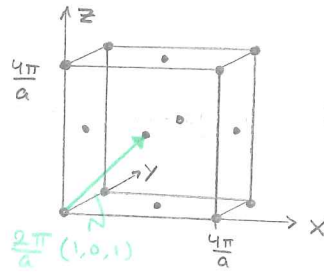
Fourierkoefficienterna blir

$$\begin{aligned} U(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V} \int_{\text{cell}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{1}{V} \int_{\text{cell}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{R}} \sum_j \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{R} + \mathbf{r}_j)) d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{V} \int_{\text{hela kristallen}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot \sum_j \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r} = \left\{ \text{Substituera } \mathbf{r} - \mathbf{r}_j = \mathbf{r}' \right\} = \\ &= \frac{1}{V} \int_{\text{hela kristallen}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}' + \mathbf{r}_j)} \sum_j \phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{V} \int_{\text{hela kristallen}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} \cdot \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \end{aligned}$$

X-punkten  $\frac{2\pi}{a}(1,0,0)$  är Brillouinzonkanten som motsvarar atomen med basvektor  $\frac{2\pi}{a}(2,0,0)$ . Den sista termen  $\sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}$  är direkt proportionell mot strukturfaktorn  $\sum_j f_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}$  för en kristall bestående av ett ämne. För Si är strukturfaktorn 0 för  $\frac{2\pi}{a}(2,0,0)$ , ty  $S = f \cdot (1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}) = f(1-1) = 0$ , och då blir  $U(\mathbf{k}) = 0 \Rightarrow$  Inget bandgap!

EF9 Vi söker kvoten mellan tröskelenergin för direkta optiska övergångar och Fermienergin. En direkt optisk övergång innebär att en elektron hoppar vertikalt till ovanstående band.

Alkalimetaller har BCC-struktur, och är då FCC reciprok. Närmaste atom ligger i  $\frac{2\pi}{a}(1,0,1)$ , och BZ-ytan ligger då i  $\frac{\pi}{a}(1,0,1)$ .



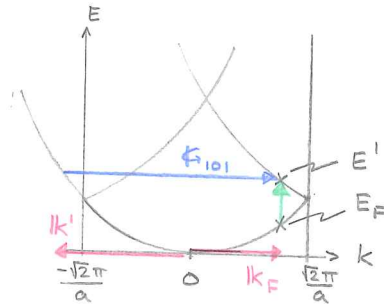
Vågvektorn  $k_{BZ}$  till 1. BZ-kanten har längd  $\frac{\pi}{a} \sqrt{1^2 + 1^2} = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}$

$$\text{Fermivågvektorn } k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \left\{ n = \frac{2}{a^3} \right\} = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a}$$

$$\frac{k_F}{k_{BZ}} = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{\sqrt{2}\pi} = 0,877 \Rightarrow k_F \in \text{1. BZ}$$

Studera nu övergången ( $\rightarrow$ ):

Den nya energin  $E'$  hör ihop med en vågvektor  $k'$  i 2. BZ och har translaterats till 1. BZ med en reciprok gittervektor  $G_{101}$ .



Alltså:  $k' + G_{101} = k_F$ , vilket kan ses i figuren ovan!

$$\text{Vi ser att } k' = k_{BZ} + k_{BZ} - k_F = \frac{\sqrt{2}\pi}{a} + \frac{\sqrt{2}\pi}{a} - k_F = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} - k_F$$

Energierna  $E'$  och  $E_F$  är:

$$E' = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{8\pi^2}{a^2} - \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} k_F + k_F^2 \right) \quad \text{och} \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$

Den sökta kvoten är:

$$\begin{aligned} \frac{E' - E_F}{E_F} &= \frac{\frac{8\pi^2}{a^2} - \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} k_F + k_F^2 - k_F^2}{k_F^2} = \frac{\frac{8\pi^2}{a^2} - \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \cdot \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a}}{\frac{(6\pi^2)^{2/3}}{a^2}} = \\ &= \frac{8\pi^2}{(6\pi^2)^{2/3}} - \frac{2\sqrt{2}\pi}{(6\pi^2)^{1/3}} \approx 0,638 \end{aligned}$$

Svar: Tröskelenergin är 0,64 gånger Fermienergin!