

KOMPLETTERANDE FORMELSAMLING FÖR FASTA TILLSTÅNDET I

(reviderad version)

Nedanstående är en minneslista över väsentliga formler och detaljer i den inledande kursen i fasta tillståndets fysik. Observera att listan inte täcker "allt man skall kunna", och att förklaringar av hur och när formlerna används saknas eller är ofullständiga.

1. GITTER. RECIPROKT GITTER. KRISTALLPLAN.

Gittervektor (direkta gittret) och fundamentala gittervektorer:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

Periodicitet:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$$

Viktiga strukturer: sc, bcc, fcc, hcp, diamant, zinksulfid, cesiumklorid, natriumklorid. Reciprok gittervektor och fundamentala reciproka gittervektorer:

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

där

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

Samband mellan gittervektorer och reciproka gittervektorer:

$$\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}) = 1$$

Den endimensionella kristallen: gitterpunkter $R = n \cdot a$, reciprokt gitter $G = j \cdot 2\pi/a$, 1:a Brillouinonen $-\pi/a < k < \pi/a$.

Fourierutveckling i tre dimensioner:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

Fourierkoefficient:

$$f_{\mathbf{G}} = \frac{1}{V_{cell}} \int_{cell} f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) dV$$

Allmän formel för planavstånd:

$$d(hkl) = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}(hkl)|}$$

Kubiska gitter:

$$d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

2. DIFFRAKTION I KRISTALLER

Braggs lag:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Spridningsamplitud:

$$\alpha = \int_V f(\mathbf{r}) \exp(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) dV$$

där

$$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

Villkor för Braggreflexion:

$$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$$

eller \mathbf{k} på zongräns. Vid Braggreflexion fås

$$\alpha = N_{cell} \cdot S_{\mathbf{G}}$$

där strukturfaktorn ges av

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{G}} &= \int_{cell} f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) dV \\ &= \sum_j f_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{d}_j) \\ &= S_{hkl} = \sum_j f_j \exp[-2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] \end{aligned}$$

och den atomära formfaktorn av

$$f_j = \int_{atom(j)} f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) dV$$

Enkel bcc: $S_{hkl} = 2f$ om $h + k + l =$ jämmt tal, $S_{hkl} = 0$ annars.

Enkel fcc: $S_{hkl} = 4f$ om (hkl) alla är udda eller alla jämna; eljest är $S_{hkl} = 0$.

3. GITTERVIBRATIONER: DISPERSION.

Vandrande våg i monoatomär kristall:

$$\mathbf{u}_j(t) = \mathbf{u}_e A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j - \omega t)]$$

Periodiska randvillkor i kub med sidan L :

$$k_x = n_x \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$k_y = n_y \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$k_z = n_z \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$(n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$$

Stående våg (en dimension):

$$u_j(t) = A \sin(kja) \sin \omega t$$

Rörelseekvation monoatomärt endimensionellt gitter:

$$M \frac{d^2}{dt^2} u_j(t) = \sum_n C_n \cdot (u_{j+n}(t) - u_j(t))$$

Dispersionrelation monoatomärt endimensionellt gitter, växelverkan endast mellan närmaste grannar:

$$\omega^2 = (2C_1/M)(1 - \cos(ka))$$

Rörelseekvationer tvåatomärt endimensionellt gitter, växelverkan endast mellan närmaste grannar; två olika massor, alla fjäderkonstanter lika:

$$M_1 \frac{d^2}{dt^2} u_j(t) = C \cdot (v_j(t) + v_{j-1}(t) - 2u_j(t))$$

$$M_2 \frac{d^2}{dt^2} v_j(t) = C \cdot (u_{j+1}(t) + u_j(t) - 2v_j(t))$$

Antal grenar med p atomer i primitiva cellen: $3p$ varav 3 akustiska. Gruppshastighet:

$$\mathbf{v}_g = \left(\frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial k_x}, \frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial k_y}, \frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial k_z} \right) = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})$$

4. GITTERVIBRATIONER: KRISTALLENS VÄRMEKAPACITET.

Bose-Einstein-fördelningen:

$$f_{BE}(T, E) = \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1}$$

Total termisk gittervibrationsenergi hos en kristall:

$$U = \int_0^\infty \hbar \omega \cdot f_{BE}(T, \hbar \omega) G(\omega) d\omega$$

Kristallens värmekapacitet pga gittervibrationer:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

per volymenhet:

$$c_V = \frac{C_V}{V}$$

Dulong-Petits lag:

$$C_V = 3Nk_B$$

Einstein-modellen:

$$U = 3N \cdot \hbar \omega \cdot f_{BE}(T, \hbar \omega)$$

Debye-modellen:

$$U = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega/k_B T} - 1} \cdot \frac{3L^3 \omega^2}{2\pi^2 v^3} d\omega$$

$$\hbar \omega_D = k_B \Theta$$

$$C_V = 9Nk_B (T/\Theta)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

5. GITTERVIBRATIONER: FONONVÄXELVERKAN, VÄRMELEDNING.

Växelverkan med fonon f (inelastisk diffraktion):

$$\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_1 \pm \hbar \mathbf{k}_f + \hbar \mathbf{G}$$

$$E_2 = E_1 \pm \hbar\omega_f$$

Ficks lag (diffusion):

$$J = -D \nabla n(\mathbf{r})$$

Diffusivitet:

$$D = \frac{1}{3} \langle v \rangle \lambda$$

Värmeledning (fononbidrag):

$$W = -K \frac{dT}{dx}$$

där

$$K = \frac{1}{3} \langle v \rangle \cdot \lambda \cdot c_V$$

6. FRI ELEKTRONGAS.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

Periodiska randvillkor i kub med sidan L :

$$k_x = n_x \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$k_y = n_y \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$k_z = n_z \cdot \frac{2\pi}{L}$$

$$(n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$$

Fermivåvektor, Fermienergi, Fermitemperatur och Fermihastighet:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

$$T_F = E_F / k_B$$

$$v_F = \hbar k_F / m = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Fermi-Dirac-fördelningen:

$$f_{FD}(T, E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

Elektroner per volymenhet och energienhet vid energin E :

$$n(E)dE = f_{FD}(T, E) \cdot g(E)dE$$

Tillståndstäthet (per volymenhet):

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} (2m/\hbar^2)^{3/2} \cdot E^{1/2}$$

Värmekapacitet per volymenhet:

$$c_V = \frac{\pi^2}{2} \frac{nk_B^2 T}{E_F}$$

Samband transportmedelvåglängd λ och relaxationstid τ :

$$\lambda = v_F \cdot \tau$$

Rörelseekvation för individuell elektron under tid $\ll \tau$:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Ekvation för drifhastigheten:

$$\frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = -\frac{\mathbf{v}_d}{\tau} - \frac{e}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_d \times \mathbf{B})$$

Strömtäthet:

$$\mathbf{j} = -nev_d$$

Konduktivitet:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2\lambda}{mv_F}$$

Mathiessens "regel":

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_g} + \frac{1}{\tau_d}$$

Metallers värmekapacitet vid låg temperatur:

$$C_V = AT^3 + \gamma T$$

Cyklotronfrekvens:

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

Hallkoefficient, definition:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B}$$

Magnetoresistans, definition:

$$\rho = \frac{E_x}{j_x}$$

Hallkoefficient, formel (1 typ laddningsbärare, laddning q):

$$R_H = \frac{1}{nq}$$

Hallvinkel:

$$\tan \phi = E_y/E_x = -\omega_c \tau$$

Termisk strömstäthet W och värmeledningsförmåga K hos elektrongasen:

$$W = -K \frac{dT}{dx}$$

$$K = \frac{1}{3} v_F^2 \tau c_V$$

Wiedemann-Franz lag:

$$\frac{K}{\sigma} = L \cdot T$$

Lorenz-talet för fri elektrongas:

$$L = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e^2}$$

7. BANDTEORI. ELEKTRONER I BLOCHTILLSTÅND.

Blochs teorem, en dimension:

$$\Psi(x+a) = e^{i\delta} \Psi(x)$$

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

$$\Psi(x) = e^{ikx} \sum_G C_G e^{iGx}$$

Bloch tillstånd betecknas $\Psi_{\mathbf{k}}(x)$. I tre dimensioner t.ex.

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Periodiska randvillkor ger

$$k_x = j_x \cdot (2\pi/L), k_y = j_y \cdot (2\pi/L), k_z = j_z \cdot (2\pi/L)$$

Bandstruktur:

$$E = E(\mathbf{k})$$

Tomma gittrets approximation:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2$$

Antal tillstånd per band = 2 · (antal primitiva enhetsceller).

Grupphastighet:

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_x}, \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_y}, \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_z} \right) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

Rörelseekvation för individuell elektron under tid $\ll \tau$:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_g \times \mathbf{B})$$

I lokalt paraboliskt band (dvs med "isotrop" eller "skalär" effektiv massa):

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_g \times \mathbf{B})$$

Med negativ effektiv massa:

$$m_h \frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_g \times \mathbf{B})$$

Rörelseekvation med t.ex. skalär eff. massa, inkluderande relaxation:

$$\frac{d\mathbf{v}_d}{dt} + \frac{\mathbf{v}_d}{\tau} = -\frac{e}{m^*} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_d \times \mathbf{B})$$

där $\mathbf{v}_d = \langle \mathbf{v}_g \rangle$ är drifhastigheten.

Effektiv massa i en dimension:

$$m^* = \left(\frac{d^2 E(k)}{d(\hbar k)^2} \right)^{-1}$$

Effektiv masstensor:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/m_{11} & 1/m_{12} & 1/m_{13} \\ 1/m_{21} & 1/m_{22} & 1/m_{23} \\ 1/m_{31} & 1/m_{32} & 1/m_{33} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{M}^{-1} \cdot (-e\mathbf{E})$$

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{a} = -e\mathbf{E}$$

8. HALVLEDARE: LADDNINGSBÄRARKONCENTRATION

Bandkanter och bandgap:

$$E_c - E_v = E_g$$

Störnivåer (impurity levels): $E_c - E_d, E_v + E_a$.

Approximativa tillståndstätheter vid bandkanterna:

$$g_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} (2m_e/\hbar^2)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

$$g_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} (2m_h/\hbar^2)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

Population av lednings- och valensband:

$$n = A_c \cdot N_c \cdot e^{-(E_c - \mu)/k_B T}$$

$$p = A_v \cdot N_v \cdot e^{-(\mu - E_v)/k_B T}$$

där A_c och A_v är antal bandkanter av respektive typ i Brillouinzonen. De effektiva tillståndstätheterna i en bandkant (c respektive v) ges av

$$N_c = 2 \cdot \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$N_v = 2 \cdot \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

dvs numeriskt

$$N_c(m^{-3}) = 4.83 \cdot 10^{21} (m_e/m)^{3/2} T^{3/2}$$

$$N_v(m^{-3}) = 4.83 \cdot 10^{21} (m_h/m)^{3/2} T^{3/2}$$

Population av störnivåer (degenerationsfaktorer negligerade):

$$N_d^+ = \frac{N_d}{1 + e^{-(E_c - E_d - \mu)/k_B T}}$$

$$N_a^- = \frac{N_a}{1 + e^{(E_v + E_a - \mu)/k_B T}}$$

Neutralitet:

$$n + N_a^- = p + N_d^+$$

(Obs lämpliga approximationer i olika temperaturområden. Jämför med $k_B T$.)

Massverkans lag:

$$p \cdot n = p_i \cdot n_i = n_i^2$$

9. HALVLEDARE: LADDNINGSBÄRARNAS RÖRELSE

Kinetisk medelenergi och termisk hastighet:

$$\langle m_e v^2 / 2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\langle m_h v^2 / 2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\langle v \rangle \propto T^{1/2}$$

Transportmedelvåglängd:

$$\lambda_e = \langle v_e \rangle \cdot \tau_e$$

$$\lambda_h = \langle v_h \rangle \cdot \tau_h$$

Strömstäthet i ett elektriskt fält:

$$\mathbf{j} = -ne\mathbf{v}_e + pe\mathbf{v}_h$$

Drifthastigheter, mobiliteter:

$$\mathbf{v}_e = -(e\tau_e/m_e)\mathbf{E} = -\mu_e\mathbf{E}$$

$$\mathbf{v}_h = +(e\tau_h/m_h)\mathbf{E} = +\mu_h\mathbf{E}$$

Mobilitetens temperaturberoende, mycket approximativt:

$$\mu \propto T^{1.5} \text{ för lägre temperaturer}$$

$$\mu \propto T^{-1.5} \text{ för högre temperaturer}$$

Konduktivitet:

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$$

Kontinuitetsekvationer för partikelströmstätheter och partikelkoncentrationer (endimensionell geometri):

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g - r - \frac{\partial J_h}{\partial x}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g - r - \frac{\partial J_e}{\partial x}$$

Diffusionsbidrag och driftbidrag till partikelströmtätheter:

$$J_h = -D_h \frac{\partial p}{\partial x} + p\mu_h E$$

$$J_e = -D_e \frac{\partial n}{\partial x} - n\mu_e E$$

Einsteins relation mellan diffusivitet och mobilitet:

$$D = \frac{k_B T \mu}{e}$$

Transportekvationer uttryckta i avvikelserna från termisk jämvikt $p' = p - p_0$ och $n' = n - n_0$:

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = g - r + D_h \frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} - p\mu_h \frac{\partial E}{\partial x} - \mu_h E \frac{\partial p'}{\partial x}$$

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + n\mu_e \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_e E \frac{\partial n'}{\partial x}$$

Gauss lag (endimensionell geometri):

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{e(p' - n')}{\epsilon_r \epsilon_0}$$

Exempelvis $n_0 \gg p_0$ ger att $(p' - n')$ är försumbart. För minoritetsbärarna fås då (g' är "extern" excitation)

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = g' - \frac{p'}{\tau_n} + D_h \frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} - \mu_h E \frac{\partial p'}{\partial x}$$

där τ_n är rekombinationslivstiden i den n-dopade halvledaren.

Diffusionslängd (ex. hål)

$$L_h = (D_h \tau_n)^{1/2}$$

Ambipolär mobilitet:

$$\mu_{amb} = \frac{n_0 - p_0}{(n_0/\mu_h) + (p_0/\mu_e)}$$

10. HALVLEDARE: pn-ÖVERGÅNGEN.

Kontaktpotential (utan pålagd spänning):

$$\Delta\Phi_0 = \frac{k_B T}{e} \ln\left(\frac{N_a N_d}{n_i^2}\right)$$

Samband spänning-ström:

$$I = I_0 \cdot (e^{eV/k_B T} - 1)$$

där

$$V = \Delta\Phi_0 - \Delta\Phi$$