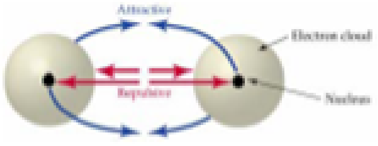
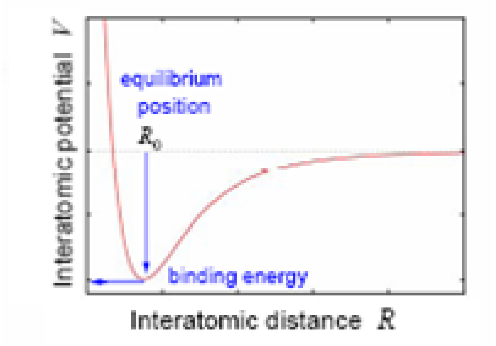
Interatomic forces

What holds a crystal together?

Attractive electrostatic interaction between electrons and nuclei – the force responsible for cohesion of solids





Force:

$$F(R) = -\frac{\partial V(R)}{\partial R}$$

$F(R) < 0$ for $R > R_0$: attraction

$F(R) > 0$ for $R < R_0$: repulsion

Types of bonding

I. Ionic crystals

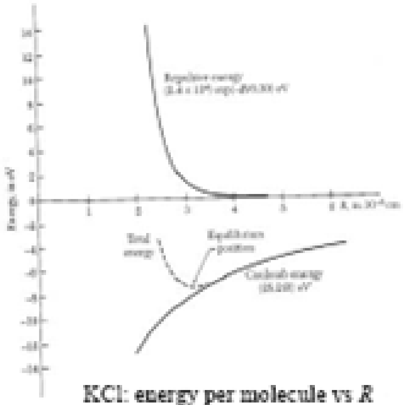
Usually involve atoms of strongly different electro-negativities (Example: alkali halides).

$$U(R) = -N\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} + N\frac{A}{R^n}$$

attractive (Coulomb) — repulsive

Ionic bond is strong
(binding energy - few eV/pair)
⇒ hardness, high melting T

electrons are strongly localized
⇒ insulators in solid form



KCl: energy per molecule vs R
(from Kittel)

Typical crystal structures: NaCl, CsCl

II. Covalent crystals

- Electron pair bond: usually one electron from each atom
- Electrons tend to be localized in part between the two atoms
- The spins of electrons in the bond are anti-parallel
- Gap between fully occupied and unoccupied states → dielectrics or semiconductors

Directionality of covalent bonds. Example: carbon

Hybridization. $2s^2 2p^2 \rightarrow 2s2p_x 2p_y 2p_z$: sp^3 tetrahedral configuration

Also possible sp^2: $2s2p_x 2p_y$ – planar (graphite, fullerenes)
remaining p_z : interlayer π-bonding

Covalent polar bond (many compound semiconductors) – intermediate case between non-polar and ionic bond. Described by effective ionic charge or fractional ionic character (between 0 and 1: 0 for Si or diamond, 0.94 for NaCl). Covalent bond is also strong, binding energies of several eV per atom

III. Metals

- Most elements in periodic table
- High electrical and thermal conductivity
- High density
- Considerable mechanical strength, but plasticity

These properties can be explained considering the metallic type of bond

Example: alkali metals – single electron weakly bound to atom – easily delocalized.

In contrast to covalent bonding, electronic wave functions are very extended compared to interatomic distances. Why total energy is reduced ?

Partially occupied electronic bands – electrons can move freely

Group II metals – two *s* electrons – should be fully occupied…
but overlapped with empty *p*-states

Transition metals: *d*-electrons are more localized – form covalent-like bonds; *s* and *p*-electrons again form a common band

Metals crystallize in closely packed structures (hcp, fcc, bcc)

IV. Van der Waals bonds

Inert gases: outer electronic shells are full – no ionic or covalent forces

Weak interatomic forces due to quantum fluctuations of charge → arising dipole moments cause a weak attractive force

Can be described in the quantum-mechanical model of two linear oscillators (given in Kittel) → results in R^{-6} dependence of potential

Binding energy in order of 0.1 eV

Crystal structures are fcc (electronic distribution is spherical, atoms pack as closely as possible)

Van der Waals forces are also responsible for bonding in organic molecular crystals. Molecules are weakly bound; often form low-symmetry crystals

They also exist in covalent or ionic crystals, but negligible

V. Hydrogen bonds

Formed between two strongly electronegative atoms (F, O, N) via H

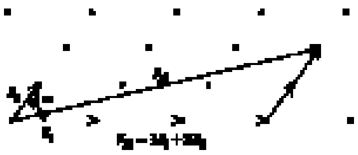
Example: ice Binding energy is also ~0.1 eV

Today: crystal structures (Omar Ch. 1.1.-1.6.)

Crystal: atoms are arranged so that their positions are periodic in all three dimensions

Atoms are bound to one another → well defined equilibrium separations;

many identical atoms → minimum energy requires every identical atom to be in identical environment → 3D periodicity



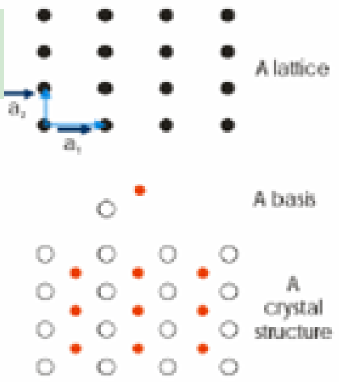
$$\vec{r}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

Ideal crystal: perfect periodicity

Real crystals are never perfect:

- surface
- impurities and defects
- thermal motion of atoms (lattice vibrations)

Crystal structure = lattice + basis

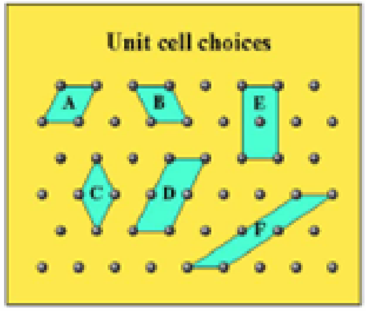


We need to identify the symmetry (lattice vectors) and the lattice contents (basis) to fully describe a structure.

(1) How do we choose lattice vectors? (This will lead us to thinking about unit cells)

Choice of primitive cells

- Which unit cell is a good choice?
- A, B, and C are primitive unit cells. Why?
- D, E, and F are not. Why?
- Notice: the volumes of A, B, and C are the same. Also, the choice of origin is different, but it doesn't matter
- Also: There is only one lattice point in the primitive unit cells.



Basic definitions

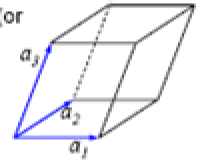
The periodic array of points is called crystal lattice.

For every lattice point there is a group of atoms (or single atom) called *basis* of the lattice

Don't confuse with a_1, a_2, a_3 - *basis vectors*

parallelogram formed by the basis vectors – *unit cell*

if a unit cell contains only one lattice point, it is called a *primitive cell* (minimum volume)



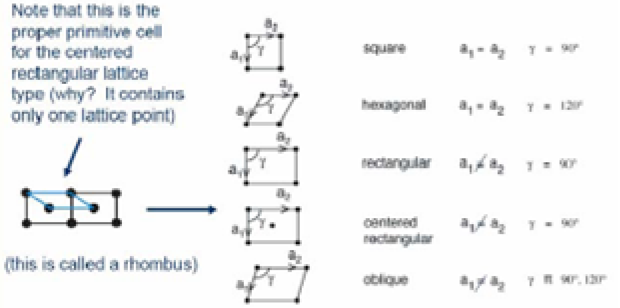
Bravais lattices – all lattice points are equivalent

2D case – 5 Bravais lattices in the next slide

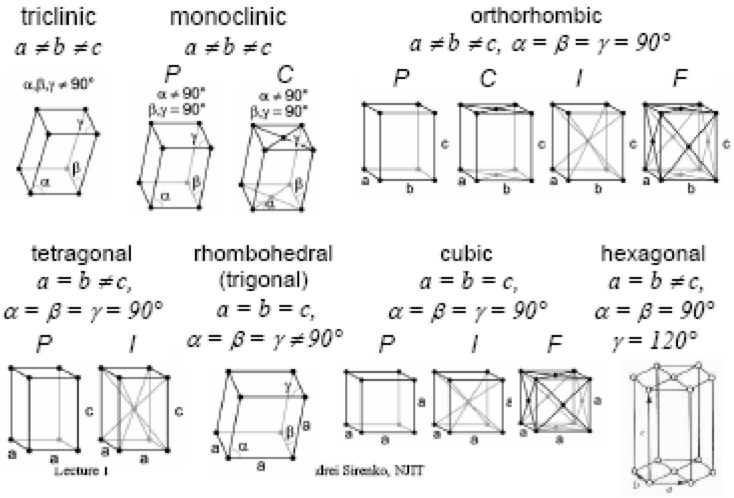
The 2D Bravais lattices

Note that this is the proper primitive cell for the centered rectangular lattice type (why? It contains only one lattice point)

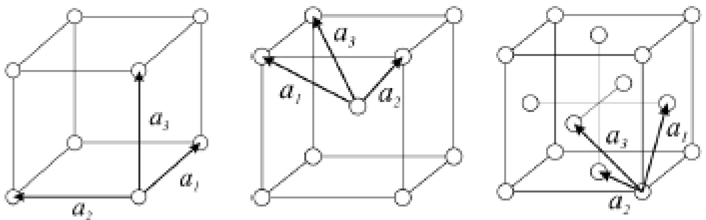
(this is called a rhombus)



7 crystal systems and 14 Bravais lattices in 3D

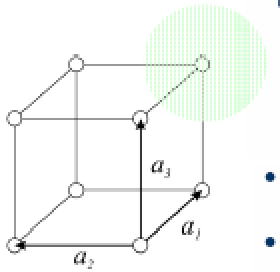


Cubic lattices: SC, BCC and FCC



simple cubic bcc fcc

Cubic lattices: SC



simple cubic

Packing fraction = (atomic volume)/(bravais unit cell volume) = $\frac{(4/3)\pi(a/2)^3}{(a^3)}$

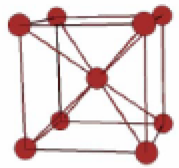
= $\pi / 6$

- The simple cubic has 1 lattice point per unit cell, with a total area of a^3
- Number of nearest neighbours: 6
- Nearest neighbour distance: a
- Number of next-nearest neighbours: 12
- Next-nearest neighbour distance: $\sqrt{2}a$ (prove this!)

The Body-Centred Cubic Lattice

(Li (at room temp.), Na, K, V, Cr, Fe, Rb, Nb, Mo, Cs, Ba, Eu, Ta)

Body-Centred Cubic Lattice (BCC)



Packing fraction = (atomic volume)/(bravais unit cell volume) = $\frac{(4/3)\pi(\sqrt{3}a/4)^3}{(a^3/2)}$

= $\sqrt{3}\pi / 8$

- The body-centred cubic lattice has 2 lattice points per unit cell, with a total primitive cell volume of $a^3/2$
- Number of nearest neighbours: 8
- Nearest neighbour distance: $\sqrt{3}\, a/2 = 0.866\, a$ (prove this!)
- Number of next-nearest neighbours: 6 (where are these?)
- Next-nearest neighbour distance: a (prove this!)

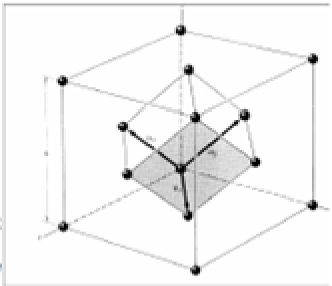
The Face-Centred Cubic Lattice

- The primitive cell of the FCC lattice is defined by the translation vectors:

$\vec{a}_1 = ½\, a\, (\vec{x} + \vec{y})$
$\vec{a}_2 = ½\, a\, (\vec{y} + \vec{z})$
$\vec{a}_3 = ½\, a\, (\vec{z} + \vec{x})$

where $\vec{x}$, $\vec{y}$, and $\vec{z}$ are the Cartesian unit vectors. These translation vectors connect the lattice pt at the origin to the points at the face centres.

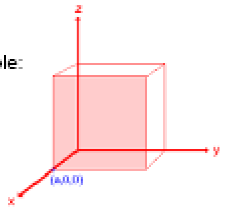
The angles between the axes are 60°



Rules for determining Miller Indices

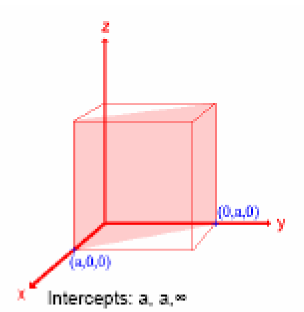
- (1) Find the intercepts on the axes in terms of the lattice constants a_1, a_2, a_3.
- (2) Take the reciprocals of these numbers and then reduce to three integers having the same ratio, usually the smallest of the three integers. The result, listed as (hkl), is called the index of the plane.

An example:

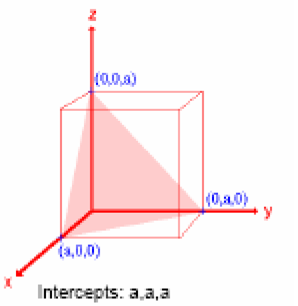


Intercepts: a, ∞,∞
Reciprocals: a/a, a/∞, a/∞
= 1, 0, 0
Miller index for this plane : (1 0 0)
(note: this is the normal vector for this plane)

Examples of Miller Indices



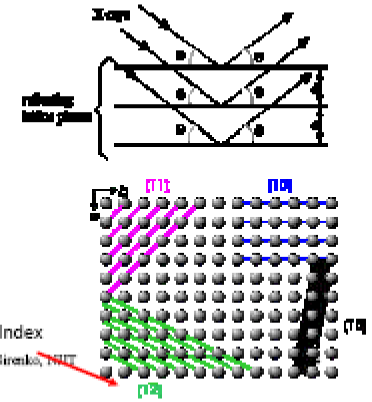
Intercepts: a, a,∞
Reciprocals: a/a, a/a, a/∞
= 1, 1, 0
Miller index for this plane : (1 1 0)



Intercepts: a,a,a
Reciprocals: a/a, a/a, a/a
= 1, 1, 1
Miller index for this plane : (1 1 1)

Indexing system for crystal planes

- Since crystal structures are obtained from diffraction experiments (in which particles diffract from planes of atoms), it is useful to develop a system for indexing lattice planes.
- We can use the lattice constants a_1, a_2, a_3, but it turns out to be more useful to use what are called Miller Indices.



Index

Diffraction of waves by crystal lattice

- Most methods for determining the atomic structure of crystals are based on scattering of particles/radiation.
- X-rays is one of the types of the radiation which can be used
- Other types include electrons and neutrons
- The wavelength of the radiation should be comparable to a typical interatomic distance of a few Å (1 Å $=10^{-10}$ m)

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E}$$

$\lambda(\text{Å}) = 12398/E(\text{eV}) \Rightarrow$ few keV is suitable energy for $\lambda = 1$ Å

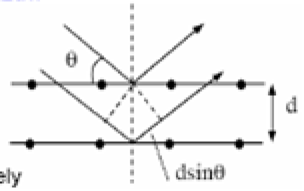
- X-rays are scattered mostly by electronic shells of atoms in a solid. Nuclei are too heavy to respond.
- Reflectivity of x-rays ~10^{-3}-10^{-5} $\Rightarrow$ deep penetration into the solid $\Rightarrow$ x-rays serve as a bulk probe

The Bragg Law

Conditions for a sharp peak in the intensity of the scattered radiation:

1) the x-rays should be specularly reflected by the atoms in one plane

2) the reflected rays from the successive planes interfere constructively



The path difference between the two x-rays: $2d \cdot \sin\theta \Rightarrow$

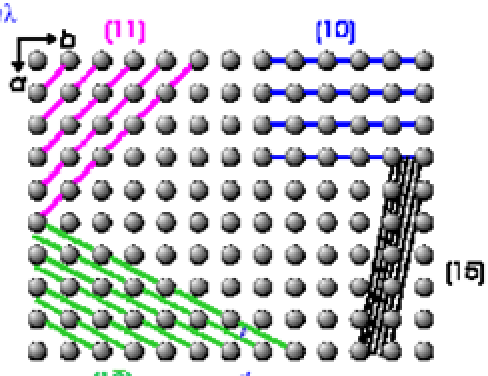
the Bragg formula: $2d \cdot \sin\theta = m\lambda$

The model used to get the Bragg law are greatly oversimplified (but it works!).

- It says nothing about intensity and width of x-ray diffraction peaks
- neglects differences in scattering from different atoms
- assumes single atom in every lattice point
- neglects distribution of charge around atoms

Meaning of *d* for 2D

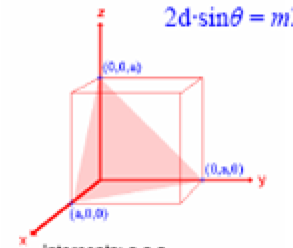
$2d \cdot \sin\theta = m\lambda$



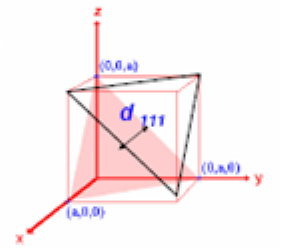
Meaning of *d* for 3D

http://www.desy.de/~luebbert/CrystalCalc_Cubic.htm

$2d \cdot \sin\theta = m\lambda$



Intercepts: a,a,a
Reciprocals: a/a, a/a, a/a
= 1, 1, 1
Miller index for this plane : (1 1 1)



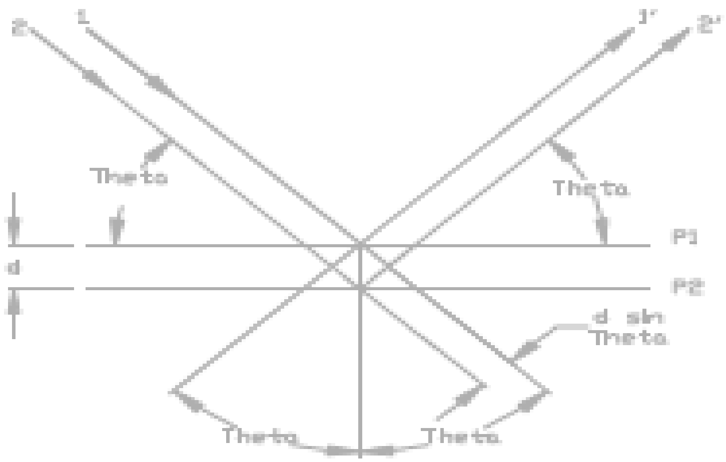
$$d_{hkl} = \frac{n}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

$$d_{111} = \frac{n \cdot a}{\sqrt{3}} \approx 3.13 \text{ A for Si with } a = 5.431 \text{ A}$$

If we use the three dimensional diffraction grating as a mathematical model, the three indices h, k, l become the order of diffraction along the unit cell axes a, b and c respectively.

It should now be clear that, depending on what mathematical model we have in mind, we use the terms X-ray reflection and X-ray diffraction as synonyms.

Let us consider an X-ray beam incident on a pair of parallel planes P1 and P2, separated by an interplanar spacing d.



The two parallel incident rays 1 and 2 make an angle (THETA) with these planes. A reflected beam of maximum intensity will result if the waves represented by 1' and 2' are in phase. The difference in path length between 1 to 1' and 2 to 2' must then be an integral number of wavelenghs, (LAMBDA). We can express this relationship mathematically in Bragg's law.

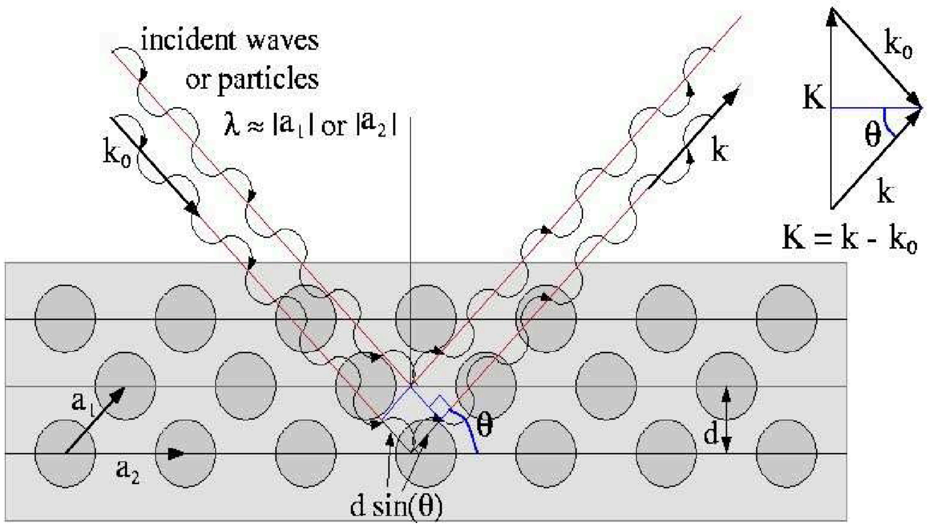
$$2d*\sin T = n * ?$$

The process of reflection is described here in terms of incident and reflected (or diffracted) rays, each making an angle THETA with a fixed crystal plane. Reflections occurs from planes set at angle THETA with respect to the incident beam and generates a reflected beam at an angle 2-THETA from the incident beam.

The possible d-spacing defined by the indices h, k, l are determined by the shape of the unit cell. Rewriting Bragg's law we get :

$$\sin T = ?/2d$$

Therefore the possible 2-THETA values where we can have reflections are determined by the unit cell dimensions. However, the intensities of the reflections are determined by the distribution of the electrons in the unit cell. The highest electron density are found around atoms. Therefore, the intensities depend on what kind of atoms we have and where in the unit cell they are located.



ఆకృతి: లాటిస్ పునరావృత దూరానికి సమానమైన పరిమాణంలో తరంగదైర్ఘ్యం కలిగిన తరంగాలు లేదా కణాలు చెల్లాచెదురు కావడం వల్ల జాలిక నిర్మాణం గురించి తెలుసుకోవడానికి వీలు కలుగుతుంది. రెండు కణాలు లేదా తరంగాల యొక్క క్రమబద్ధమైన జోడింపుకు అది *(బ్రాగ్ కండిషన్)* అవసరం, మరియు సుదూర తెరపై చెల్లాచెదురు గరిష్టాన్ని ఇస్తుంది. $2d$పాపం() ● ✦

క్లాసికల్ థియరీ ఆఫ్ డిఫ్రాక్షన్

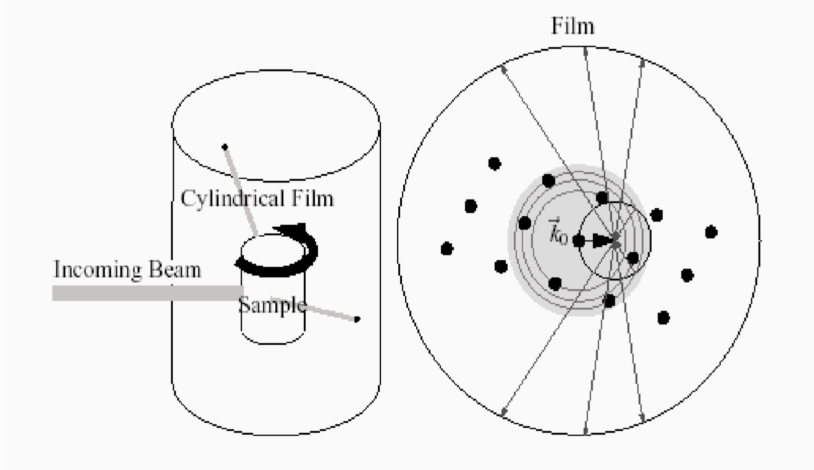
మూడు ప్రాథమిక అంచనాలు:

1. చెల్లాచెదురుగా ఉన్న "వస్తువు"కు లక్ష్యాన్ని కలపడాన్ని వివరించే ఆపరేటర్ (ఈ సందర్భంలో ఆపరేటర్ యొక్క సాంద్రత) హామిల్టన్ తో ప్రయాణిస్తుంది. → క్లాసికల్ ఫిజిక్స్ రంగంలో..

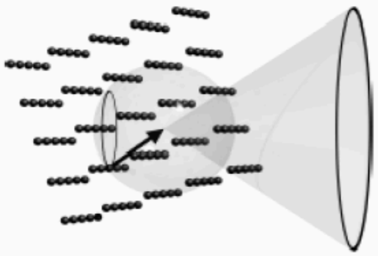
2. హ్యూజెన్స్ సూత్రం: లక్ష్యం యొక్క ప్రతి రేడియేటెడ్ బిందువు మూలంతో సమానమైన ఫ్రీక్వెన్సీ కలిగిన ద్వితీయ మూల గోళాకార తరంగాలుగా పనిచేస్తుంది మరియు వ్యాప్తి చెందిన తరంగాల యొక్క పరిధి వాటి పరిధి మరియు సాపేక్ష దశలను పరిగణనలోకి తీసుకొని తరంగదైర్ఘ్యాల మొత్తం.

3. ఫలితంగా గోళాకార తరంగాలు మళ్లీ చెల్లాచెదురు కావు.

ఉదాహరణకి న్యూట్రాన్ చెల్లాచెదురు కొరకు పూర్తి క్వాంటమ్ సిద్ధాంతంలో ఇది ఫెర్మి గోల్డెన్ రూల్ ద్వారా చెదరగొట్టే రేటును అంచనా వేయడానికి అనుగుణంగా ఉంటుంది, అనగా, అని పిలుస్తారు ఫస్ట్-ఆర్డర్ బోర్న్ అంచనా.



Powders



$$\theta = \sin^{-1}(K/2k_0)$$

and the radius r on film of the scattering ring due to reciprocal lattice vector $\vec{K}$ is

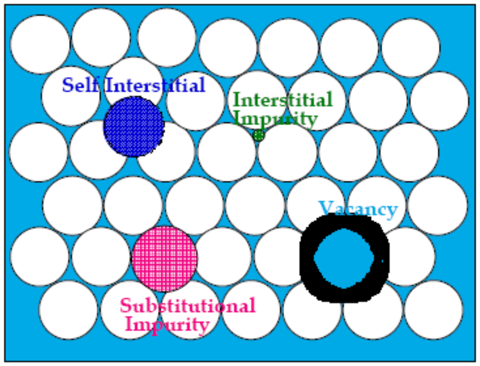
$$r = D\tan(2\theta).$$

http://www.youtube.com/watch?v=bkaECMbLy58 (ఎక్స్ రే ఉత్పత్తి)

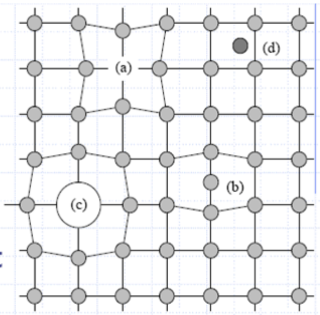
Point defects

- Vacancy
  - An empty atomic site
- Interstitial
  - An atom somewhere other than an atomic site
  - - Self-interstitial
  - - Impurity interstitial
- Substitutional impurity
  - Some “foreign” species on an atomic site

Point Defects in Metals

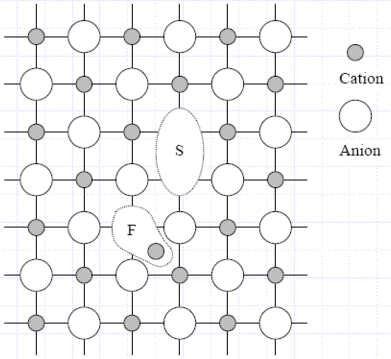


Defects



- 0D defects: several types
- vacancy (a)
  - missing atom at lattice point
- interstitial (b)
  - atoms positioned *not* at lattice point
- substitutional impurity (c)
  - foreign atom at lattice point
- interstitial impurity atom (d)
  - foreign atoms *not* positioned at lattice point

Frenkel and Schottky defects



- Frenkel (F) and Schottky (S) defects

Energy difference U_S

between perfect and defective crystal

$U_S = n_S \varepsilon_S$ $\quad$ ε_S energy to displace

Number of possible configurations

n_S pairs of vacancies

distributed over N positions

vacancies

n_S distributed over N sites

$w = N!/(N-n_S)!n_S!$

Using Stirling's approximation

$n_S = (N-n_S)\exp(-\varepsilon_S/2kT)$

$\cong N\exp(-\varepsilon_S/2kT)$

Last step

$n_S << N$ (typically $n_S = 0.1\%\ N$)

Frenkel defects

Binary crystal AB

N regular and N^* interstitial sites

Number of interstitial atoms n_F

Energy of interstitial atoms ε_F

Number of indistinguishable distributions

n_F vacancies over N sites

$w = N!/(N-n_F)!n_F!$

Number of indistinguishable distributions

n_F interstitial atoms over N^* sites

$w^* = N^*!/(N^*-n_F)!n_F!$

Total number for Frenkel defect

$W = ww^*$

Schottky defects

Binary crystal AB

N ion pairs

n_S vacancies A and n_S vacancies B

ε_S energy to displace an AB ion pair

estimate for B&A vacancies

$W = w^2$

Helmholtz energy $F = U - TS$

$F = n_S \varepsilon_S - kT \ln W$

$= n_S \varepsilon_S - 2kT \ln[N!/(N-n_S)!n_S!]$

స్టాటిస్టికల్ మెకానిక్స్ అనేది చాలా విషయాల యొక్క "సగటు" ప్రవర్తన గురించి - పరమాణువులు, అణువులు లేదా కణాలు. ఇటువంటి సగటులు సాధారణంగా వ్యవస్థ యొక్క ప్రతి సంభావ్య స్థితిని మరియు ప్రతి రాష్ట్రంలో ఉండే సంభావ్యతను పరిగణనలోకి తీసుకోవడం ద్వారా తీసుకోబడతాయి. కొన్ని శక్తి స్థాయిల మధ్య కణాల సేకరణ పంపిణీ గురించి మీరు ఆలోచించవచ్చు.

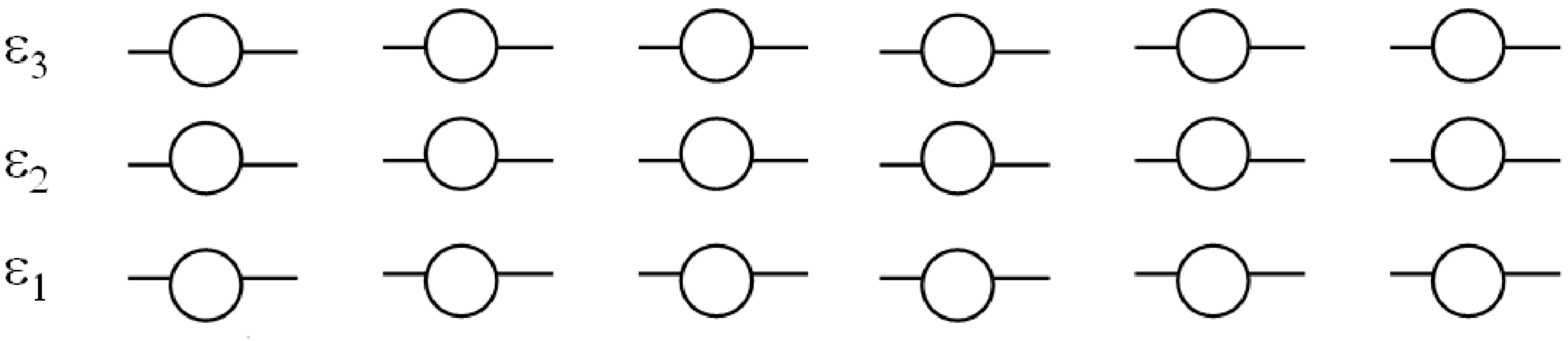
మీ వద్ద 10 కణాల సేకరణ ఉందని మరియు ఆక్రమించగల 2 సంభావ్య శక్తి స్థితులు ఉన్నాయని చెప్పండి. అందువల్ల స్థానం మరియు వేగంలో అంతర్గత అనిశ్చితి గుర్తించదగిన మరియు వేరుచేయలేని క్వాంటమ్ కణాలను విడిగా పరిగణనలోకి తీసుకోవాల్సిన అవసరం ఉంది.

కణాలు గుర్తించదగినవి అయితే, అంటే మీరు వాటిపై లేబుళ్ళను ఉంచవచ్చు (కణం # 1, కణం # 2, మొదలైనవి). ఒకవేళ #1,#2,#3,#4,#5 కణాలు 1వ స్థితిలో ఉంటే, మరియు #6,#7,#8,#9,#10 స్థితి 2లో ఉన్నట్లయితే, అది మీరు మార్చాల్సిన దానికంటే భిన్నమైన పంపిణీ, ఉదాహరణకు, #6 మరియు #1. ఈ 10 కణాలను 2 స్థితుల మధ్య అమర్చడానికి 2^10 = 1024 మార్గాలు ఉన్నాయి. ఏదేమైనా, కణాలు వేరుచేయలేకపోతే, మీరు వాటిని లేబుల్ చేయలేరని దీని అర్థం, కాబట్టి స్థితి 1 లో 5 కణాలు మరియు 2 స్థితిలో 5 కణాల సేకరణను మీరు రెండు కణాల మధ్య మార్చినప్పటికీ వాటిని అమర్చడానికి ఒకే మార్గంగా భావిస్తారు. గుర్తించదగిన కణాల కోసం 1024 మార్గాలతో పోలిస్తే, దీనిని చేయడానికి 11 వేర్వేరు మార్గాలు మాత్రమే ఉన్నాయి!

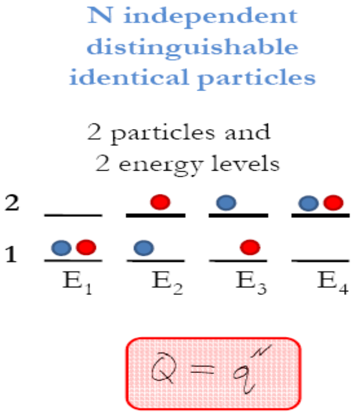
వేరుచేయలేని కణాలు ఒకే రకమైన కణాలు. ఒకరి నుంచి మరొకరికి చెప్పడం సాధ్యం కాదు. ఓ స్పెషల్ కేసు ఉంది. పరమాయస్కాంతి వలె వాటిని ఘనపదార్థంలో స్థిరపరిస్తే, వాటి స్థానం సహాయంతో వాటిని వేరుగా చెప్పవచ్చు. అయితే, ఆ సందర్భంలో, అవి గుర్తించదగిన కణాలుగా మారతాయి. వాయువులోని పరమాణువులు, లోహంలో ఎలక్ట్రాన్లు, కుహరంలో ఫోటాన్లు వంటి స్థిరం కాని సందర్భాల్లో మనకు ఆసక్తి ఉంటే అవన్నీ వేరుచేయలేనివి.

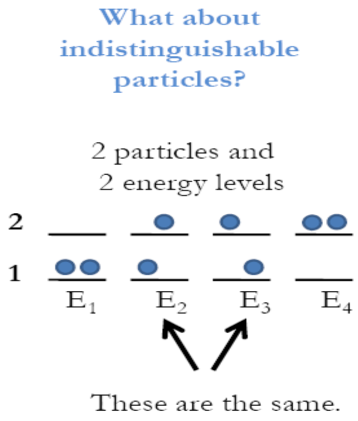
అవి గుర్తించదగిన కణాల నుండి ఎలా భిన్నంగా ఉంటాయి?

3 కణాలు ఉన్నాయని అనుకుందాం, ఒక్కొక్కటి 3 శక్తి స్థాయిలు _1, _2 మరియు _3. స్థూల స్థితి n1 = 1, n2 = 1 మరియు n3 = 1 పరిగణించండి. అంటే ప్రతి స్థాయికి ఒక పరమాణువు ఉంటుంది: కణాలు గుర్తించదగినవి అయితే, అప్పుడు 6 సూక్ష్మ స్థితులు ఉంటాయి. అయితే, కణాలు వేరుచేయలేకపోతే, 1 మాత్రమే ఉంటుంది. అంకెలను తుడిచివేయండి - అవన్నీ ఒకేలా కనిపిస్తాయి



అదే విధంగా, కణాలను కొన్ని అంతర్గత క్వాంటం సంఖ్య ద్వారా వివక్ష చూపలేమని మేము అర్థం చేసుకున్నాము.
జోడించండి : ఉదాహరణకు, మనకు ఒకే స్పిన్ యొక్క రెండు ఎలక్ట్రాన్లు ఉండవచ్చు. సాధారణీకరించబడిన రెండు-కణ తరంగాల పనితీరు $!(x_1, x_2)$, ఇది సంభావ్యతను ఇస్తుంది $|!(x_1, x_2)|2dx_1dx_2$ విరామంలో ఒకేసారి ఒక కణాన్ని కనుగొనడం x_1 కు $x_1 + dx_1$ మరియు మరొకటి మధ్య x_2 కు $x_2 + dx_2$, కేవలం అర్థవంతంగా మాత్రమే ఉంది
అయితే $|!(x_1, x_2)|2 = |!(x_2, x_1)|2$, ఎందుకంటే ఈ రెండింటిలో ఏది మనకు ఎక్కడ దొరుకుతుందో తెలియదు. దీన్ని బట్టి చూస్తే..
తరంగాల పనితీరు మార్పిడి కింద రెండు (మరియు, సాధారణంగా, రెండు మాత్రమే) సంభావ్య సౌష్టవాలను ప్రదర్శిస్తుంది: $!(x_1, x_2) = !(x_2, x_1)$ లేదా $!(x_1, x_2) = -!(x_2, x_1).2$ ఇద్దరు అయితే..
సారూప్య కణాలు కొన్ని స్థితులలో సౌష్టవ తరంగాల పనితీరును కలిగి ఉంటాయి, ఆ రకం కణాలు ఎల్లప్పుడూ సౌష్టవ తరంగాల పనితీరును కలిగి ఉంటాయి మరియు వీటిని ఇలా పిలుస్తారు bosons. (ఒకవేళ
మరేదైనా స్థితిలో అవి యాంటిసిమ్మెట్రిక్ వేవ్ ఫంక్షన్ కలిగి ఉంటాయి, అప్పుడు ఆ స్థితుల యొక్క రేఖీయ సూపర్ పొజిషన్ సిమెట్రిక్ లేదా యాంటిసిమ్మెట్రిక్ కాదు.
అందువలన సంబంధాన్ని సంతృప్తి పరచలేకపోయింది. $|!(x_1, x_2)|2 = |!(x_2, x_1)|2$.) అదేవిధంగా, యాంటిసిమ్మెట్రిక్ తరంగాల పనితీరు కలిగిన కణాలను ఏమని పిలుస్తారు fermions.





పై డిస్ట్రిబ్యూషన్లను ఎంబీ, బీఈ, ఎఫ్ డీ స్టాటిస్టికల్ డిస్ట్రిబ్యూషన్స్ గా వర్గీకరించవచ్చు.

Tఎం-బి గణాంకాలు మరియు ఎఫ్డి గణాంకాలు (మరియు వాటి క్వాంటమ్ కజిన్, బోస్-ఐన్స్టీన్ గణాంకాలు) మధ్య ముఖ్యమైన వ్యత్యాసం ఏమిటంటే, మాక్స్వెల్-బోల్ట్జ్మాన్ గణాంకాలు "గుర్తించదగినవి" అని పిలువబడే వాటిని వివరిస్తాయి. కణాలు, అయితే ఎఫ్-డి మరియు బి-ఇ గణాంకాలను "వేరుచేయలేని" కణాలను వివరించడానికి ఉపయోగిస్తారు.
ఈ కణాల సేకరణ యొక్క గణాంక ప్రవర్తనను వివరించడానికి ప్రయత్నిస్తున్నప్పుడు ఈ గణాంకాలు ఉపయోగించబడతాయి. స్టాటిస్టికల్ మెకానిక్స్ అనేది చాలా విషయాల యొక్క "సగటు" ప్రవర్తన

గురించి - పరమాణువులు, అణువులు లేదా కణాలు. ఇటువంటి సగటులు సాధారణంగా వ్యవస్థ యొక్క ప్రతి సంభావ్య స్థితిని మరియు ప్రతి రాష్ట్రంలో ఉండే సంభావ్యతను పరిగణనలోకి తీసుకోవడం ద్వారా తీసుకోబడతాయి. కాబట్టి, ఉదాహరణకు, మీరు కొన్ని శక్తి స్థాయిల మధ్య కణాల సేకరణ పంపిణీ గురించి ఆలోచించవచ్చు. మీ వద్ద 10 కణాల సేకరణ ఉందని మరియు ఆక్రమించగల 2 సంభావ్య శక్తి స్థితులు ఉన్నాయని చెప్పండి. సమతౌల్య గణాంక యాంత్రికశాస్త్రం యొక్క ప్రాథమిక సిద్ధాంతం, ఇది ప్రాథమికంగా "సమతౌల్యం వద్ద ఉన్న వ్యవస్థలో, అన్ని అందుబాటులో ఉన్న స్థితులు సమానంగా ఉంటాయి" అని చెబుతుంది. ఇది నిజమైతే, గుర్తించదగిన కణాల విషయంలో, వ్యవస్థ అన్ని ఏర్పాట్లలో సమాన మొత్తంలో సమయాన్ని గడుపుతుంది. ఏదైనా నిర్దిష్ట ఏర్పాటులో ఉండే అవకాశం 1/మొత్తం సంభావ్య రాష్ట్రాలు.

ఏదేమైనా, ఈ మొత్తం సంభావ్య స్థితులలో కొన్ని ఒక నిర్దిష్ట శక్తి స్థాయిలో ఒకే కణాల సంఖ్యను కలిగి ఉన్నాయని గమనించండి. అంటే, ప్రతి స్థితిలోని కణాల సంఖ్య* యొక్క నిర్దిష్ట పంపిణీలు ఇతరులకన్నా ఎక్కువగా ఉంటాయి, మరియు మీరు కణాల సంఖ్యను పెంచుతూ ఉంటే, ఒకే పంపిణీ ఆధిపత్యం వహించడం ప్రారంభిస్తుంది. చాలా కణాలు మరియు చాలా శక్తి స్థితుల పరిమితిలో, మీరు ఆ పంపిణీని ఒక విపరీతమైన క్షీణతగా రాయవచ్చు. దీనిని మాక్స్ వెల్-బోల్ట్జ్ మన్ డిస్ట్రిబ్యూషన్ ఫంక్షన్ అని పిలుస్తారు, మరియు ఇది పేరుచేయలేని కణాలకు ఒక నిర్దిష్ట శక్తి స్థాయి ఎంత "జనాభా" అని మీకు చెబుతుంది, మరోవైపు, మనం విరామం ఇవ్వాలి మరియు మరింత వ్యత్యాసాన్ని గీయాలి, పేరుచేయలేని కణాలకు వర్తించే 2 రకాల గణాంకాలు ఉన్నాయి, ఒకటి బోస్-ఐన్ స్టీన్ మరియు మరొకటి ఫెర్మి-డిరాక్. బి-ఇ గణాంకాలలో, ప్రతి స్థితిలో కణాల సంఖ్యపై ("బోసాన్లు" అని పిలుస్తారు - ఫోటాన్లు, హె4 పరమాణువులు, గ్లూయాన్లు వంటివి) పరిమితులు లేవు, కాబట్టి మేము మా 26 సంభావ్య ఏర్పాట్లను పొందుతాము. మళ్ళీ మనం మన సమాన సంభావ్యత సిద్ధాంతాన్ని వర్తింపజేస్తాము, మరియు దాని నుండి మనకు బోస్-ఐన్ స్టీన్ డిస్ట్రిబ్యూషన్ ఫంక్షన్ లభిస్తుంది, ఇది ఎమ్-బి డి.ఎఫ్ ను పోలి ఉంటుంది కాని తక్కువ ఉష్ణోగ్రతల వద్ద తీవ్రంగా భిన్నంగా ప్రవర్తిస్తుంది. (ఎంత భిన్నంగా ఉందో చూడటానికి "బోస్-ఐన్స్టీన్ కండెన్సేట్" చూడండి!)

ఏదేమైనా, ఎఫ్-డి గణాంకాలలో, కణాలు "పౌలీ మినహాయింపు సూత్రం" అని పిలువబడే మరొక పరిమితికి లోబడి ఉంటాయి - అంటే, గరిష్టంగా 2 కణాలు ఏ స్థితిని అయినా ఆక్రమించగలవు.

మనం 9 క్వాంటా ఉదాహరణతో 6 కణాలను తీసుకుంటే, ఈ కణాలకు *5* సంభావ్య ఏర్పాట్లు మాత్రమే ఉన్నాయని మీరు చూస్తారు ("ఫెర్మియాన్లు" అని పిలుస్తారు - ఎలక్ట్రాన్లు, న్యూట్రాన్లు, ప్రోటాన్లు వంటివి). మళ్ళీ, అన్ని రాష్ట్రాలలో సమాన సంభావ్యత యొక్క ఆవశ్యకత వర్తిస్తుంది, మరియు మేము ఫెర్మి-డిరాక్ పంపిణీ విధిని పొందవచ్చు, ఇది ఇతర 2 తో సమానంగా కనిపిస్తుంది కాని చాలా భిన్నంగా ప్రవర్తిస్తుంది. "ప్రతి స్థాయిలో గరిష్టంగా 2" ఆవశ్యకత పంపిణీని తక్కువ శక్తి స్థాయిల నుండి దూరం చేస్తుంది.

పరమాణువులు, ఎలక్ట్రాన్లు, ఏవైనా పెద్ద సంఖ్యలో "వస్తువుల" సమక్షంలో మాత్రమే చాలా ఆసక్తికరమైన భౌతికశాస్త్రం వస్తుంది. ఇంత పెద్ద సంఖ్యలో కణాలకు సంక్లిష్టమైన చలన సమీకరణాన్ని నిర్మించడం (ఆచరణాత్మకంగా) అసాధ్యం, అయితే సూత్రప్రాయంగా ఇది చేయవచ్చు. (3-బాడీ సమస్యను కూడా పరిష్కరించడానికి ప్రయత్నించిన ఎవరైనా అది ఎంత దయనీయంగా ఉందో మీకు చెబుతారు.)

కాబట్టి సేకరణ యొక్క "సగటు" ప్రవర్తనను వివరించడానికి మేము ఈ గణాంక వివరణలను ఉపయోగిస్తాము. సెమీకండక్టర్ల సిద్ధాంతానికి ఫెర్మి గణాంకాలు చాలా ముఖ్యమైనవి, ఉదాహరణకు, చాలా పరస్పర సంకర్షణ ఎలక్ట్రాన్లు బ్యాండ్ గ్యాప్ అని పిలువబడే నిషిద్ధ శక్తి జోన్ ఏర్పడటానికి కారణమవుతాయి.

పరమాణువుల వాయువులోని వేగాల పంపిణీని వివరించడానికి మాక్స్ వెల్ డిస్ట్రిబ్యూషన్ లు ఒక మంచి మార్గం.

అలాగే, ఒక ప్రయోగవేత్త ఈ గణాంకాలను రివర్స్ లో ఉపయోగించవచ్చు. అవి ఒక కణం యొక్క శక్తి స్థాయిల పంపిణీని కొలవగలవు, అవి ఏ గణాంకానికి లోబడతాయో వారికి చెప్పగలవు మరియు దాని నుండి కణం యొక్క లక్షణాల గురించి ఇతర సమాచారాన్ని అంచనా వేయవచ్చు.

సాధారణంగా, మీరు "క్లాసికల్" వ్యవస్థతో వ్యవహరించేటప్పుడు మాక్స్వెల్-బోల్ట్జ్మాన్ గణాంకాలు / పంపిణీని మరియు మీరు క్వాంటమ్ యాంత్రిక వ్యవస్థతో వ్యవహరించేటప్పుడు ఎఫ్-డి లేదా బి-ఇ సూత్రీకరణలను ఉపయోగించాలనుకుంటున్నారు. తరచుగా కష్టమైన భాగం రెండింటి మధ్య వ్యత్యాసాన్ని చెబుతుంది.

for students Density of state for light BBody.pdf - Adobe Reader
File Edit View Document Tools Window Help
1 / 2 102% Find

Derivation of the density of states for dispersion relationship c=λν

Electromagnetic radiation is considered as standing waves insider the cavity, satisfying boundary conditions:

$\Psi(0,t)=0$ and $\Psi(L_x,t)=0$ and $\Psi(L_y,t)=0$ and $\Psi(L_z,t)=0$

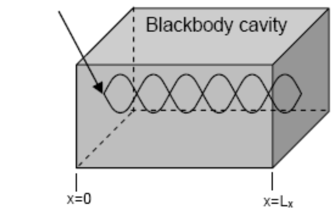
For plane waves,

$\Psi(0,t)=0 \Rightarrow \Psi(x,t) = A\sin(kx)\cos(\omega t)$

$\Psi(L_x,t)=0 \qquad \Rightarrow \sin(k_xL_x)=0$

$\Rightarrow k_xL_x=n_x\pi \quad n_x=1, 2, 3, \dots$

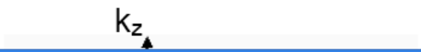
$$\Rightarrow \; k_x = \frac{n_x\pi}{L_x} \qquad n_x = 1, 2, 3, ...$$



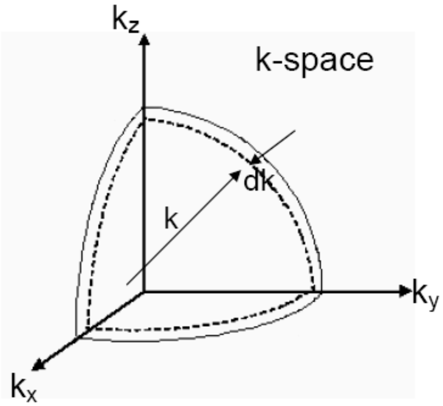
In other words, because of the boundary conditions, k cannot be any value it wants. Similarly for y and z directions:

$$k_x = \frac{n_x\pi}{L_x} \;;k_y = \frac{n_y\pi}{L_y} \;;k_z = \frac{n_z\pi}{L_z} \qquad n_x, n_y, \text{and } n_z = 1, 2, 3, ...$$

A possible standing wave can be considered as a state defined by wave vector (k_x, k_y, k_z) in the cavity. Note that the states are packed together close together uniformly in the k-space, because L is large (hence we can use integration). We now want to calculate the total number of possible standing waves (i.e. states) within a spherical shell between radii k and k+dk. Spherical shell is considered because all states within the shell have the same magnitude of k and hence the same frequency.



start
college
for students Density ...
3:38 PM



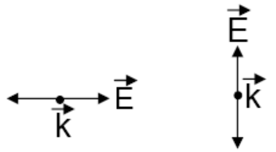
With Δn=1, volume per state in k-space

$$= \left(\frac{\pi}{L_x}\right)\left(\frac{\pi}{L_y}\right)\left(\frac{\pi}{L_z}\right) = \frac{\pi^3}{L_x L_y L_z} = \frac{\pi^3}{V} \quad (V = \text{volume of cavity})$$

Therefore, the total number of possible standing waves within the spherical shell

$$= \frac{1}{8} \times \frac{\text{Volume of spherical shell}}{\text{Volume per state}}$$

The factor 1/8 is inserted because k_x, k_y, and k_z have to positive. However, there are two possible polarizations for a transverse standing wave:



Wave ($\vec{k}$) is traveling out of paper

Therefore we have to add a factor of 2 in the above equation.

∴ the total number of possible standing waves within the spherical shell

$$= 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{\text{Volume of spherical shell}}{\text{Volume per state}}$$

$$= 2 \times \frac{1}{8} \times 4\pi k^2 dk \Big/ \frac{\pi^3}{V}$$

$$= \frac{\pi k^2 V dk}{\pi^3}$$

But k is related to ν:

$$\lambda\nu = c \Rightarrow 2\nu\pi/c = 2\pi/\lambda \Rightarrow k = 2\nu\pi/c$$

Therefore, the total number of standing waves between ν and ν+dν is:

$$\frac{\pi k^2 V dk}{\pi^3} = \frac{\pi \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 V \frac{2\pi\, d\nu}{c}}{\pi^3} = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} V$$

Define density of states N(ν) as the number of states per unit frequency ν per unit volume

start college for students Density ... theo 12-13 2 - Micros... 3:39 PM

for students Density of state for light BBody.pdf - Adobe Reader

But k is related to ν:

$$\lambda\nu = c \;\Rightarrow\; 2\nu\pi/c = 2\pi/\lambda \Rightarrow k = 2\nu\pi/c$$

Therefore, the total number of standing waves between ν and ν+dν is:

$$\frac{\pi k^2 V dk}{\pi^3} = \frac{\pi\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 V \frac{2\pi\, d\nu}{c}}{\pi^3} = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} V$$

Define density of states N(ν) as the number of states per unit frequency ν per unit volume V. Therefore, number of states between energy ν and ν +d ν = G(ν)d ν × V

$$\therefore \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} V = N(\nu)d\nu V \;\Rightarrow\; \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} V = G(\nu)d\nu V$$

$$\Rightarrow N(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3}$$

or $$N(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$$

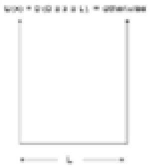
Free electron gas in one dimension

Assume an electron of mass m is confined to a length L by infinite barriers

Schrödinger equation for electron wave function $\psi_n(x)$: $H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$
E_n - the energy of electron orbital

assume the potential lies at zero ⇒ H includes only the kinetic energy ⇒

$$H\psi_n(x) = \frac{p^2}{2m}\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$



Note: this is a one-electron equation – neglected electron-electron interactions

General solution: $A\sin q_n x + B\cos q_n x$

boundary conditions for the wave function: $\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0$

⇒ $B = 0$; $q_n = \pi n/L$; n - integer

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$$

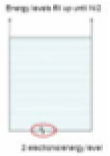
Substitute, obtain the eigenvalues:

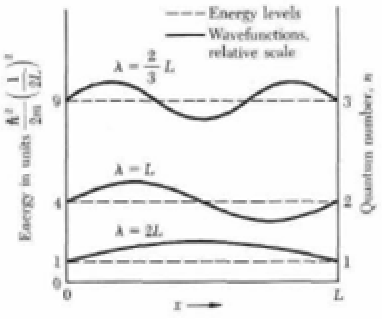
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2$$

First three energy levels and wave-functions of a free electron of mass m confined to a line of length L:

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2$$





picture from Kittel

Fermi energy

We need to accommodate N valence electrons in these quantum states.

Pauli principle: no two electrons can have identical quantum numbers.

Electronic state in a 1D solid is characterized by quantum numbers n and m_s, where n describes the orbital $\psi_n(x)$, and m_s - the projection of the spin: $m_s = \pm ½$.

⇒ each orbital labeled by the quantum number n can accommodate two electrons, one with spin up and one with spin down orientation.

Let n_F - the highest filled energy level. Start filling the levels from the bottom ($n = 1$) and continue until all N electrons are accommodated.

Condition $2n_F = N$ determines n_F

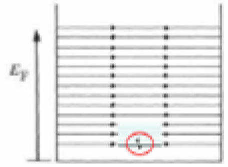
The energy of the highest occupied level is called the ***Fermi energy E_F***

For the one-dimensional system of N electrons $E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi N}{2L}\right)^2$

Finite temperature: the Fermi - Dirac distribution

The ground state of the N electron system at zero temperature: all the electronic levels are filled up to the Fermi energy.

All the levels above are empty.



What happens if the temperature is increased?

The kinetic energy of the electron gas increases with temperature

⇒ some energy levels become occupied which were vacant at 0 K; some levels become vacant which were occupied at 0 K.

The distribution of electrons among the levels is described by the *distribution function*, $f(E)$ - the probability that the level E is occupied

Fermi - Dirac distribution: $$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT} + 1}$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT} + 1}$$

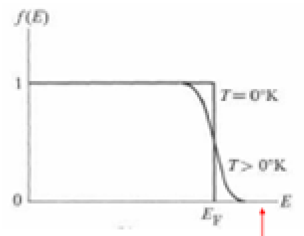
μ – *the chemical potential.*

It can be determined in a way that the total number of electrons in the system is equal to N.

At $T = 0$ K $\quad \mu = E_F$

At any T if $f(E) = 1/2$ when $E = \mu$

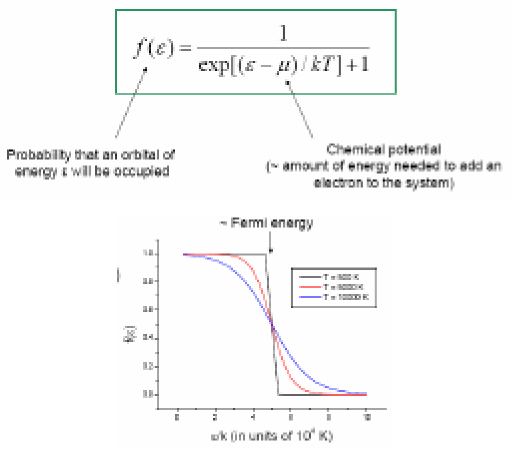
$f(E)$ at $T = 0$ K and $T > 0$ K



High energy tail of $f(E)$, when $E - \mu >> k_BT$: $\quad f(E) = e^{(\mu - E)/k_BT}$

called *Maxwell – Boltzmann distribution*

Effect of temperature on Fermi-Dirac distribution



http://www.toutestquantique.fr/#metaux (క్వాంటమ్ ప్రయోగాలు)

Limitations of free electron model

The free electron model gives a good insight into many properties of metals, such as the heat capacity, thermal conductivity and electrical conductivity. However, it fails to explain a number of important properties and experimental facts, for example:

• the difference between metals, semiconductors and insulators

•It does not explain the occurrence of positive values of the Hall coefficient.

•Also the relation between conduction electrons in the metal and the number of valence electrons in free atoms is not always correct. Bivalent and trivalent metals are consistently less conductive than the monovalent metals (Cu, Ag, Au)

⇒ need a more accurate theory, which would be able to answer these questions – *the band theory*

The problem of electrons in a solid – a many-electron problem

The full Hamiltonian contains not only the one-electron potentials describing the interactions of the electrons with atomic nuclei, but also pair potentials describing the electron-electron interactions

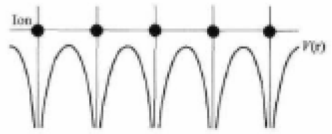
The many-electron problem is impossible to solve exactly ⇒ simplified assumptions needed

The simplest approach we have already considered - a free electron model

The next step is an independent electron approximation: assume that all the interactions are described by an effective potential.

One of the most important properties of this potential - its periodicity:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{T})$$

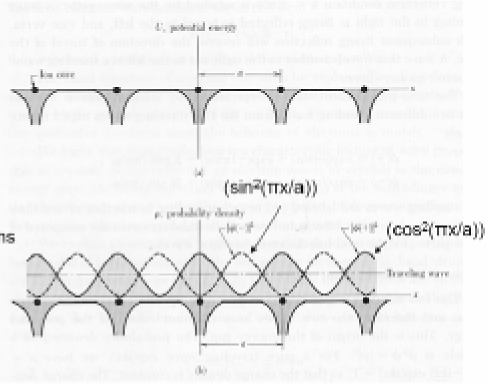


Periodic Lattice

• What does the electron density (ψ^2) look like?

Note: only electrons which have a wavelength commensurate with the lattice ($k = \pi/a$) feel the periodic potential, and they form standing wave patterns

One of these (+) has electrons near the positive cores, the other has the electrons in between the cores (so they have different energies)



Bloch theorem

Write the Schrödinger equation the approximation of non-interacting electrons:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$\psi(\mathbf{r})$ – wave function for one electron.

Independent electrons, which obey a one-electron Schrödinger equation a periodic potential $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{T})$ - *Bloch electrons*

Bloch theorem: the solution has the form $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ where

$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{T})$ - a periodic function with the same period as the lattice

Bloch theorem introduces a wave vector **k**, which plays the same fundamental role in the motion in a periodic potential that the free electron wave vector **k** plays in the free-electron theory.

$\hbar\mathbf{k}$ is known as the *crystal momentum* or *quasi-momentum*

Another conclusions following from the Bloch theorem:
the wave vector **k** can always be confined to the first Brillouin zone

This is because any k' not in the first Brillouin zone can be written as
k' = k + G Then, if the Bloch form holds for **k'**, it will also hold for **k**

Energy bands

Substitute the solutions in the Bloch form $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ into the Schrodinger equation, obtain: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(i\mathbf{k}+\nabla)^2 + U(\mathbf{r})\right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

with periodic condition: $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{T})$

For any **k**, find an infinite number of solutions with discrete energies $E_n(\mathbf{k})$, labeled with the band index n

For each n, the set of electronic levels specified by $E_n(\mathbf{k})$ is called an *energy band*. The information contained in these functions for different n and **k** is referred to as the *band structure* of the solid.

Number of states in a band

The number of states in a band within the first Brillouin zone is equal to the number of primitive unit cells N in the crystal.

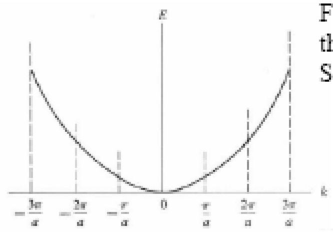
Consider the one-dimensional case, periodic boundary conditions. Allowed values of k form a uniform mesh whose unit spacing is $2\pi/L$

⇒ The number of states inside the first zone, whose length is $2\pi/a$, is $(2\pi/a)/(2\pi/L) = L/a = N$, where N is the number of unit cells

A similar argument may be applied in 2- and 3-dimensional cases.

Taking into account two spin orientations, conclude that there are $2N$ independent states (orbitals) in each energy band.

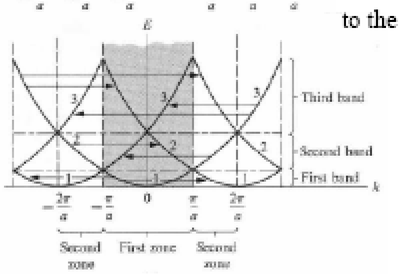
Nearly free electron (weak binding) model

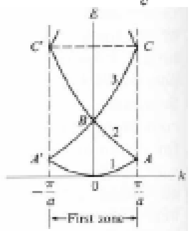


First step: empty-lattice model. When the potential is zero the solutions of the Schrödinger equation are plane waves:

$$E^0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \qquad \psi_k^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_c}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

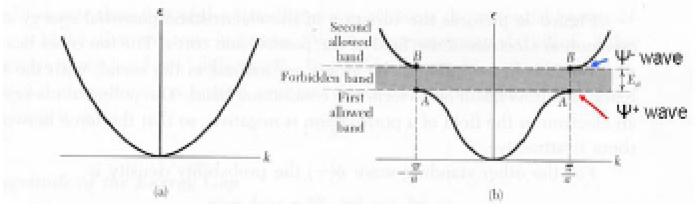
where the wave function is normalized to the volume of unit cell V_c





The Energy Gap

- So, there are 2 solutions for the energies at this K-value
- This is what gives rise to the energy gap



$$E_g = \int U(x)[|\psi^+|^2 - |\psi^-|^2]dx$$

(difference between the expectation values of these 2 energy levels)

Now, turn on a weak potential. Consider it as a weak periodic perturbation in Hamiltonian.

From perturbation theory have:

$$E_i(k) = E_i^0(k) + \langle \psi_{i,k}^0 | U | \psi_{i,k}^0 \rangle + \sum_{k',j} \frac{|\langle j,k' | U | i,k \rangle|^2}{E_i^0(k) - E_j^0(k)}$$

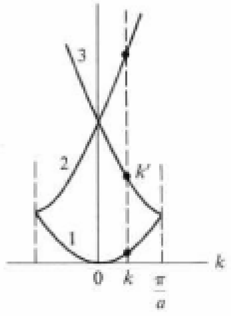
where index i refers to i^{th} band; ^{0} refers to empty-lattice model.

The first term is the undisturbed free-electron value for the energy.

The second term is the mean value of the potential in the state i, k
– constant independent of k – can set to zero

The third term – the 2nd order correction

– vanishes except $\mathbf{k'} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$



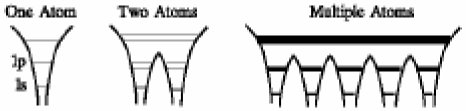
Tight binding model

Assumptions:

– atomic potential is strong, electrons are tightly bound to the ions

– the problem for isolated atoms is solved: know wave functions ϕ_n and energies E_n of atomic orbitals

– weak overlapping of atomic orbitals



Start with 1D case

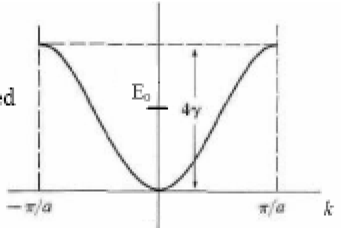
Bloch function in the form: $\psi(k,x) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{j=1}^{N} e^{ikX_j} \phi_n(x - X_j)$

where $X_j = ja$ – position of the jth atom, a – lattice constant;
$\psi_n(x - X_j)$ – atomic orbital centered around the jth atom – large near X_j, but decays rapidly avay from it.
Small overlap exists only between the neighboring atoms

$$E(k) = E_0 + 4\gamma \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Original energy level E_n has broadened into an *energy band*.

The bottom of the band is E_0
- located at $k = 0$



The band width = 4γ – proportional to the overlap integral

For small k, $ka/2 << 1$ (near the zone center)

$E(k) - E_0 = \gamma a^2 k^2$ - quadratic dispersion, same as for free electron

$E(k) - E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ where $m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2}\frac{1}{\gamma}$ *- effective mass*

For $k = \pi/2$, you will find that

$m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2}\frac{1}{\gamma}$

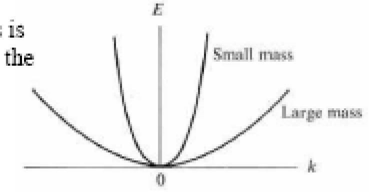
Generally, $m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$

The results obtained can be extended to 3D case.

For simple cubic lattice, get

$$E(k) = E_0 + 4\gamma\left[\sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_z a}{2}\right)\right]$$

$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$ Effective mass is determined by the curvature of dispersion



Generally, anisotropic:

$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$ $i,j = x,y,z$ *- inverse effective mass tensor*

Velocity of the Bloch electron: $v = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}$ 3D: $v = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$

Physical origin of the effective mass

Since $\mathbf{p} = m_0\mathbf{v}$ - true momentum, one can write: $m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_{tot} = \mathbf{F}_{ext} + \mathbf{F}_L$

The total force is the sum of the external and lattice forces.

But $m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m_0 \frac{\mathbf{F}_{ext}}{m^*}$

So, we can write

$$m^* = m_0 \frac{\mathbf{F}_{ext}}{\mathbf{F}_{ext} + \mathbf{F}_L}$$

The difference between m^* and m_0 lies in the presence of the lattice force $\mathbf{F}_L$

Holes

Already know that *completely filled bands do not contribute to the current*

Therefore, can write: $0 = \int_{zone} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \int_{occupied} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\mathbf{v}(\mathbf{k}) + \int_{unoccupied} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\mathbf{v}(\mathbf{k})$

we had for the current density: $\mathbf{j} = -e \int_{occupied} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\mathbf{v}(\mathbf{k})$

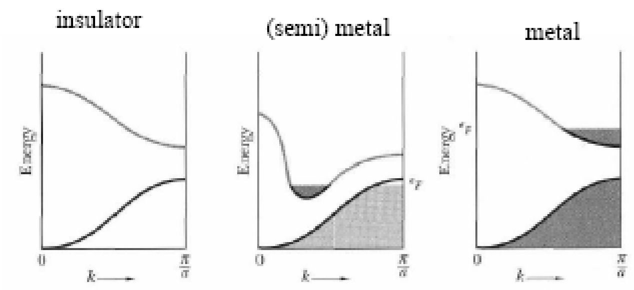
can equally well write this in the form: $\mathbf{j} = +e \int_{unoccupied} \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\mathbf{v}(\mathbf{k})$

⇒ *the current produced by electrons occupying a specified set of levels in a band is precisely the same as the current that would be produced if the specified levels were unoccupied and all other levels in the band were occupied but with particles of charge +e - holes.*

Convenient to consider transport of the holes for the bands which are almost occupied, so that only a few electrons are missing.

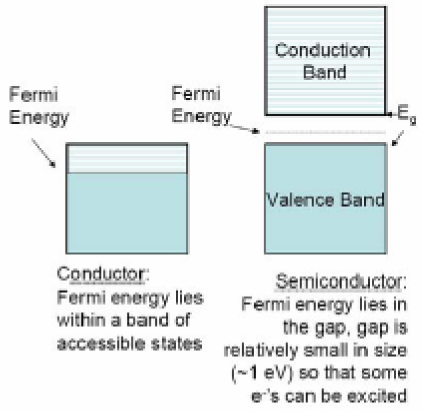
Can introduce the effective mass for the holes. It has a *negative* sign.

Metals, Insulators, semimetals, semiconductors



Conductors vs. Semiconductors

- Remember, where the Fermi level is is largely determined by the density: $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$
- It is also determined by how many electrons are free, and how many are tied up in chemical bonds
- The lower the density of carriers, the higher the Fermi Energy
- When the Fermi Energy is so high that it appears in the gap, then we have a semiconductor
- If the gap is large enough, we will have an insulator (you need a large amount of energy to make the electrons mobile)

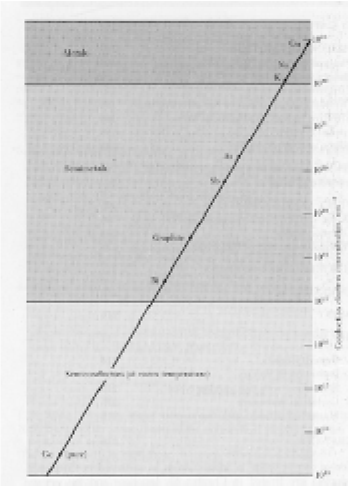


Crystal structure and bonding

Semiconductors include a large number of substances of different chemical and physical properties. Main types of semiconductors:

- Group IV semiconductors - Si, Ge.
  - Crystallize in the diamond structure (fcc lattice with a basis composed of two identical atoms)
  - covalent crystals, i.e., the atoms are held together by covalent bonds
  - the covalent electrons forming the bonds are hybrid sp^3 atomic orbitals
- III-V (GaAs, InP, etc.), II-VI (ZnSe, ZnS) semiconductors and alloys
  - zinc blende structure (same as diamond but with two different atoms) or hexagonal wurtzite structure (GaN)
  - also covalent bonds, but polar - the distribution of the electrons along the bond is not symmetric
- Some other compounds (I-VII, various oxides, halogenides, organic semiconductors...)

Carrier density of metals and semiconductors



IV Semiconductors

C $1s^2\underbrace{2s^22p^2}$

Si $1s^22s^22p^6\underbrace{3s^23p^2}$

Ge $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}\underbrace{4s^24p^2}$

III-V Semiconductors

Ga $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}\underbrace{4s^24p^1}$

As $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}\underbrace{4s^24p^3}$

Semiconductors have higher resistance than metals (~ 10^{-2} to 10^9 Ohm·cm)

Typical metals: 10^{-6} Ohm·cm

http://www.toutestquantique.fr/#metaux

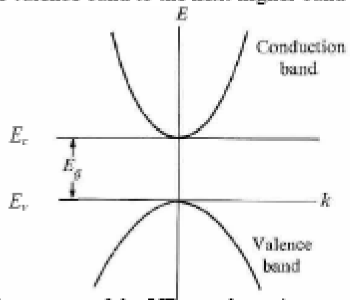
Band structure

Semiconductor - a solid in which the highest occupied energy band, the *valence band* (VB), is completely full at $T = 0°K$

However, the gap above this band is small, so that electrons may be excited thermally at room temperature from the valence band to the next-higher band – the *conduction band* (VB).

Electrons are excited across the gap → the bottom of the conduction band is populated by electrons, and the top of the valence band - by holes.

As a result, both bands are now only partially full → can carry a current if an electric field were applied



The energy of the CB has the form:

$$E_c(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

The energy of the VB may be written as

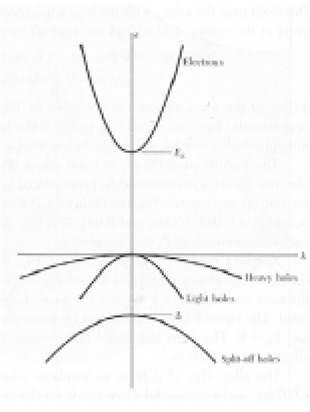
$$E_v(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$

Meaning of curvature

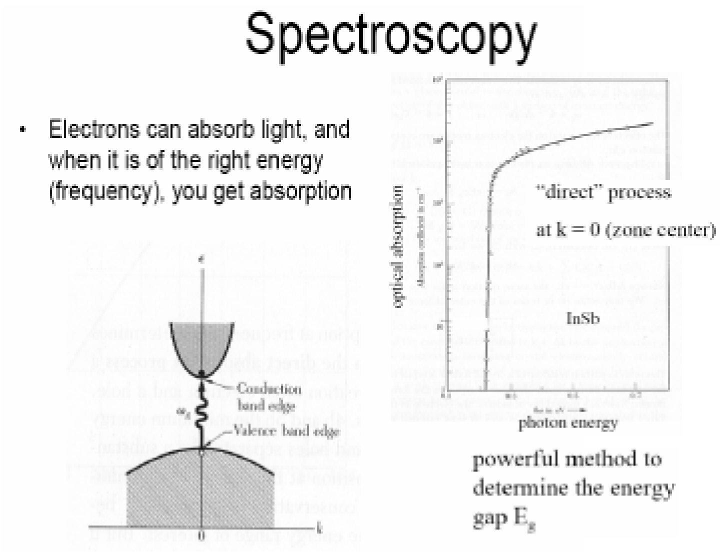
- A small curvature – small effective mass
- A large curvature – large effective mass
- Examples of band masses:

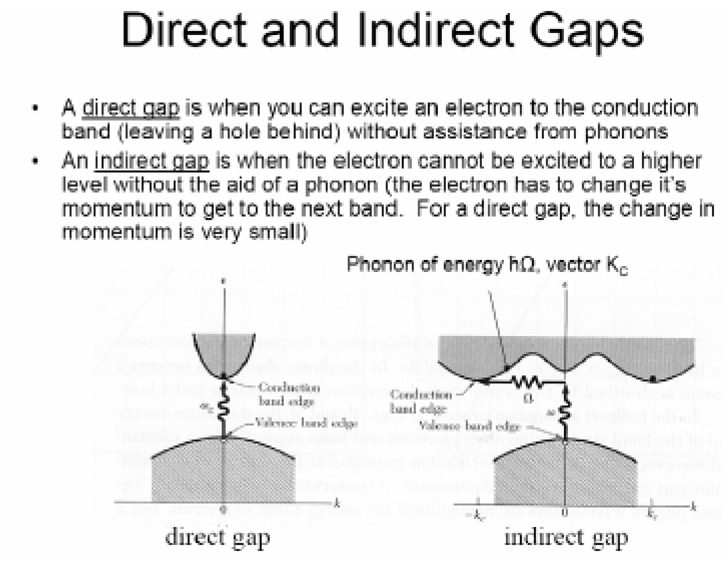
Table 1. Effective masses of electrons and holes in direct gap semiconductors

Crystal	Electron m_e/m	Heavy hole m_{hh}/m	Light hole m_{lh}/m	Split-off hole m_{soh}/m	Spin-orbit Δ, eV
InSb	0.015	0.39	0.021	(0.11)	0.82
InAs	0.026	0.41	0.025	0.08	0.43
InP	0.073	0.4	(0.078)	(0.15)	0.11
GaSb	0.047	0.3	0.06	(0.14)	0.80
GaAs	0.066	0.5	0.082	0.17	0.34
Cu_2O	0.99	—	0.58	0.69	0.13



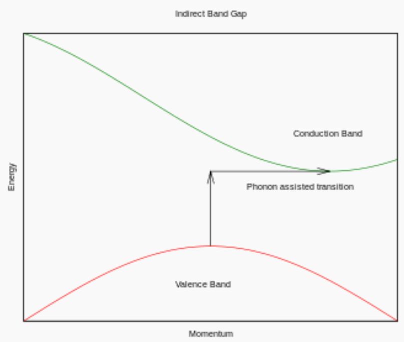
(see assignment for an example of m* for Ge)

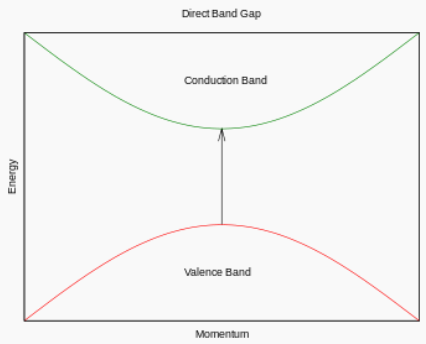




ప్రత్యక్ష మరియు పరోక్ష బ్యాండ్ అంతరాలు

లో సెమీకండక్టర్ ఫిజిక్స్, ది బ్యాండ్ గ్యాప్ a యొక్క సెమీకండక్టర్ ఇది ఎల్లప్పుడూ రెండు రకాలలో ఒకటి, ఎ డైరెక్ట్ బ్యాండ్ గ్యాప్ లేదా ఒక పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్. బ్యాండ్ గ్యాప్ ని "డైరెక్ట్" అంటారు. వేగం ఎలక్ట్రాన్లు మరియు రంధ్రాలు రెండింటిలోనూ ఒకేలా ఉంటాయి. కండక్షన్ బ్యాండ్ మరియు valence band; ఒక ఎలక్ట్రాన్ నేరుగా ఫోటాన్ ను విడుదల చేయగలదు. ఒక "పరోక్ష" గ్యాప్ లో, ఒక ఫోటాన్ విడుదల చేయబడదు ఎందుకంటే ఎలక్ట్రాన్ ఒక మధ్యంతర స్థితి గుండా ప్రయాణించి స్ఫటిక జాలికకు వేగాన్ని బదిలీ చేయాలి. కనీస శక్తి స్థితి[మార్చు] కండక్షన్ బ్యాండ్ మరియు గరిష్ట-శక్తి స్థితి valence band ప్రతి ఒక్కటి ఒక నిర్దిష్ట లక్షణాన్ని కలిగి ఉంటాయి క్రిస్టల్ వేగం (కె-వెక్టర్) లో Brillouin zone. కె-వెక్టర్లు ఒకేలా ఉంటే, దానిని "డైరెక్ట్ గ్యాప్" అంటారు. అవి భిన్నంగా ఉంటే, దానిని "పరోక్ష అంతరం" అంటారు.





ఎనర్జీ వర్సెస్. క్రిస్టల్ వేగం బ్యాండ్ గ్యాప్ ఉన్న సెమీకండక్టర్ కోసం, వాహక బ్యాండ్ (ఆకుపచ్చ) లోని అత్యల్ప-శక్తి స్థితి నుండి వేలెన్స్ బ్యాండ్ (ఎరుపు) లో అత్యధిక-శక్తి స్థితికి చలనంలో మార్పు లేకుండా ఎలక్ట్రాన్ మారదని చూపిస్తుంది. ఇక్కడ, దాదాపు అన్ని శక్తి ఒక దాని నుండి వస్తుంది ఫోటాన్ (నిలువు బాణం), అయితే దాదాపు అన్ని వేగం ఒక బాణం నుండి వస్తుంది ఫోనాన్ (సమాంతర బాణం).

ఎనర్జీ వర్సెస్. క్రిస్టల్ వేగం డైరెక్ట్ బ్యాండ్ గ్యాప్ ఉన్న సెమీకండక్టర్ కొరకు, ఒక ఎలక్ట్రాన్ వాహక బ్యాండ్ (ఆకుపచ్చ) లోని అత్యల్ప-శక్తి స్థితి నుండి వేలెన్స్ బ్యాండ్ (ఎరుపు) లో మార్పు లేకుండా అత్యధిక-శక్తి స్థితికి మారగలదని చూపిస్తుంది. క్రిస్టల్ వేగం. ఒక ఫోటాన్ ఒక ఎలక్ట్రాన్ ను వేలెన్స్ బ్యాండ్ నుంచి కండక్షన్ బ్యాండ్ కు ప్రేరేపించే పరివర్తనను చిత్రించారు.

రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ యొక్క చిక్కులు

ఇవి కూడా చూడండి: రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్

[మార్చు] మధ్య పరస్పర చర్యలు ఎలక్ట్రాన్ లు, రంధ్రాలు, ఫోనోన్స్, ఫోటాన్ లు, మరియు సంతృప్తిపరచడానికి ఇతర కణాలు అవసరం అవుతాయి శక్తి పరిరక్షణ[మార్చు] మరియు క్రిస్టల్ వేగం (అంటే, మొత్తం కె-వెక్టర్ పరిరక్షణ). సెమీకండక్టర్ బ్యాండ్ గ్యాప్ దగ్గర శక్తి ఉన్న ఫోటాన్ దాదాపు సున్నా వేగాన్ని కలిగి ఉంటుంది. ఒక ముఖ్యమైన ప్రక్రియను ఇలా అంటారు. రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్, వాహక బ్యాండ్ లోని ఎలక్ట్రాన్ వేలెన్స్ బ్యాండ్ లోని రంధ్రాన్ని నాశనం చేస్తుంది, అదనపు శక్తిని ఫోటాన్ గా విడుదల చేస్తుంది. ఎలక్ట్రాన్ వాహక బ్యాండ్ మినీమా సమీపంలో కె-వెక్టర్ కలిగి ఉంటే ప్రత్యక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ సెమీకండక్టర్లో ఇది సాధ్యమవుతుంది (రంధ్రం అదే కె-వెక్టర్ను పంచుకుంటుంది), కానీ పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ సెమీకండక్టర్లో సాధ్యం కాదు, ఎందుకంటే ఫోటాన్లు స్ఫటిక వేగాన్ని మోయలేవు, తద్వారా స్ఫటిక ద్రవ్యవేగం యొక్క పరిరక్షణ ఉల్లంఘించబడుతుంది. పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ మెటీరియల్ లో రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ జరగాలంటే, ఈ ప్రక్రియలో ఒక శోషణ లేదా ఉద్గారం కూడా ఉండాలి. ఫోనాన్, ఇక్కడ ఫోనాన్ ద్రవ్యవేగం ఎలక్ట్రాన్ మరియు రంధ్ర ద్రవ్యవేగం మధ్య వ్యత్యాసానికి సమానం. (దీనికి బదులుగా, ఇది కూడా కలిగి ఉంటుంది) స్ఫటిక లోపం, ఇది ప్రధానంగా అదే పాత్రను పోషిస్తుంది.) ఫోనాన్ యొక్క ప్రమేయం ఈ ప్రక్రియను ఒక నిర్దిష్ట వ్యవధిలో సంభవించే అవకాశం చాలా తక్కువగా చేస్తుంది, అందుకే డైరెక్ట్ బ్యాండ్ గ్యాప్ మెటీరియల్స్ కంటే పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ మెటీరియల్స్ లో రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ చాలా నెమ్మదిగా ఉంటుంది.. అందుకే.. కాంతి-ఉద్గారం మరియులేజర్ డయోడ్ లు ఇవి దాదాపు ఎల్లప్పుడూ డైరెక్ట్ బ్యాండ్ గ్యాప్ మెటీరియల్స్ తో తయారు చేయబడతాయి మరియు పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ మెటీరియల్స్ వంటివి కావు. సిలికాన్.

పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ పదార్థాలలో రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ నెమ్మదిగా ఉంటుంది అంటే, చాలా సందర్భాలలో, రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్లు మొత్తం రీకాంబినేషన్లలో ఒక చిన్న నిష్పత్తిగా ఉంటాయి, చాలా రీకాంబినేషన్లు రేడియేటివ్ కానివి, పాయింట్ లోపాల వద్ద లేదా ధాన్యం సరిహద్దుల వద్ద జరుగుతాయి. ఏదేమైనా, ఉత్తేజిత ఎలక్ట్రాన్లు ఈ రీకాంబినేషన్ ప్రదేశాలకు చేరకుండా నిరోధించబడితే, అవి చివరికి రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ ద్వారా వేలెన్స్ బ్యాండ్లోకి తిరిగి పడిపోవడం తప్ప వేరే మార్గం లేదు. దీనిని సృష్టించడం ద్వారా చేయవచ్చు స్థానభ్రంశం మెటీరియల్ లో లూప్. లూప్ అంచున, "స్థానభ్రంశం స్థానభ్రంశం" పైన మరియు క్రింద ఉన్న విమానాలు వేరు చేయబడతాయి, ఇది ప్రతికూల పీడనాన్ని సృష్టిస్తుంది, ఇది వాహక బ్యాండ్ యొక్క శక్తిని గణనీయంగా పెంచుతుంది, ఫలితంగా ఎలక్ట్రాన్లు ఈ అంచును దాటలేవు. స్థానభ్రంశం లూప్ కు నేరుగా ఎగువన ఉన్న ప్రాంతం లోపం లేనిది (నాన్-రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ సాధ్యం కాదు), ఎలక్ట్రాన్లు రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ ద్వారా వేలెన్స్ షెల్ లోకి తిరిగి పడతాయి మరియు తద్వారా కాంతిని విడుదల చేస్తాయి. ఈ సూత్రం ఆధారంగానే "డి.ఇ.ఎల్.ఇ.డి.లు" (స్థానభ్రంశం ఇంజనీర్డ్ ఎల్.ఇ.డి.లు) ఆధారపడి ఉంటాయి.

కాంతి శోషణకు చిక్కులు

రేడియేటివ్ రీకాంబినేషన్ యొక్క ఖచ్చితమైన రివర్స్ కాంతి శోషణ. పైన పేర్కొన్న అదే కారణంగా, బ్యాండ్ గ్యాప్ కు దగ్గరగా ఉన్న ఫోటాన్ శక్తి ఉన్న కాంతి ప్రత్యక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ కంటే పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ పదార్థంలో గ్రహించడానికి ముందు చాలా దూరం చొచ్చుకుపోతుంది (కనీసం బ్యాండ్ గ్యాప్ అంతటా ఉత్తేజకరమైన ఎలక్ట్రాన్ల కారణంగా కాంతి శోషణ ఉంటుంది).

ఈ వాస్తవం చాలా ముఖ్యం photovoltaics (సోలార్ సెల్స్). సిలికాన్ అత్యంత సాధారణ సౌర-కణ పదార్థం, ఇది పరోక్ష-అంతరం అయినప్పటికీ, అందువల్ల కాంతిని బాగా గ్రహించదు. సిలికాన్ సోలార్ సెల్స్ సాధారణంగా వందల సంఖ్యలో ఉంటాయి. micro మీటర్లు మందమైన; ఇది చాలా సన్నగా ఉంటే, చాలా కాంతి (ముఖ్యంగా పరారుణలో) సులభంగా వెళుతుంది. మరోవైపు సన్నని-ఫిల్మ్ సోలార్ సెల్స్ డైరెక్ట్ బ్యాండ్ గ్యాప్ మెటీరియల్స్ తో తయారు చేయబడతాయి (అవి) CdTe, CIGS లేదా CZTS), ఇవి కాంతిని చాలా సన్నని ప్రాంతంలో గ్రహిస్తాయి మరియు తత్ఫలితంగా చాలా సన్నని క్రియాశీల పొరతో (తరచుగా 1 మైక్రోమీటర్ కంటే తక్కువ మందం) తయారు చేయబడతాయి.

పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ పదార్థం యొక్క శోషణ స్పెక్ట్రం సాధారణంగా ప్రత్యక్ష పదార్థం కంటే ఉష్ణోగ్రతపై ఎక్కువగా ఆధారపడి ఉంటుంది, ఎందుకంటే తక్కువ ఉష్ణోగ్రతల వద్ద తక్కువ ఫోనాన్లు ఉంటాయి, అందువల్ల పరోక్ష పరివర్తనను సృష్టించడానికి ఫోటాన్ మరియు ఫోనాన్లను ఒకేసారి గ్రహించే అవకాశం తక్కువ. ఉదాహరణకు, సిలికాన్ గది ఉష్ణోగ్రత వద్ద కనిపించే కాంతికి అపారదర్శకంగా ఉంటుంది, కానీ ఎరుపు కాంతికి పారదర్శకంగా ఉంటుంది ద్రవ హీలియం ఉష్ణోగ్రతలు, ఎందుకంటే ఎరుపు ఫోటాన్లు పరోక్ష పరివర్తనలో మాత్రమే గ్రహించబడతాయి.

[[మార్చు]]శోషణ కోసం సూత్రాలు

బ్యాండ్ గ్యాప్ ప్రత్యక్ష లేదా పరోక్ష ఉపయోగాలా అని నిర్ణయించడానికి ఒక సాధారణ మరియు సరళమైన పద్ధతి శోషణ స్పెక్ట్రోస్కోపీ. కొన్ని శక్తులను కుట్ర పన్నడం ద్వారా శోషణ గుణకం ఫోటాన్ శక్తికి వ్యతిరేకంగా, బ్యాండ్ గ్యాప్కు ఏ విలువ ఉందో మరియు అది ప్రత్యక్షంగా ఉందో లేదో సాధారణంగా చెప్పవచ్చు.

డైరెక్ట్ బ్యాండ్ గ్యాప్ కోసం, శోషణ గుణకం α ఈ క్రింది సూత్రం ప్రకారం కాంతి ఫ్రీక్వెన్సీకి సంబంధించినది:[1][2]

$$\alpha \approx A^* \sqrt{h\nu - E_{\mathrm{g}}} \text{ తో } A^* = \frac{q^2 x_{vc}^2 (2m_{\mathrm{r}})^{3/2}}{\lambda_0 \epsilon_0 \hbar^3 n}$$

ఎక్కడ:

- α అనేది శోషణ గుణకం, కాంతి ఫ్రీక్వెన్సీ యొక్క విధి
- ν ఇది లైట్ ఫ్రీక్వెన్సీ
- h is ప్లాంక్ యొక్క స్థిరాంకం ($h\nu$ అనేది ఒక శక్తి యొక్క శక్తి ఫోటాన్ ఫ్రీక్వెన్సీతో ν)
- $\hbar$ is ప్లాంక్ యొక్క స్థిరాంకం తగ్గింది ($\hbar = h/2\pi$)
- E_{g} బ్యాండ్ గ్యాప్ ఎనర్జీ
- A^* అనేది ఒక నిర్దిష్ట ఫ్రీక్వెన్సీ-స్వతంత్ర స్థిరాంకం, పై ఫార్ములాతో
- $m_{\text{r}} = \frac{m_{\text{h}}^* m_{\text{e}}^*}{m_{\text{h}}^* + m_{\text{e}}^*}$ ఎక్కడ m_{e}^* మరియు m_{h}^* అవి ప్రభావవంతమైన ద్రవ్యరాశి వరుసగా ఎలక్ట్రాన్ మరియు రంధ్రం (m_{r} దీనిని ఎ " అని పిలుస్తారుతగ్గిన ద్రవ్యరాశి")
- q అనేది ప్రాథమిక ఆవేశం
- n అనేది (వాస్తవం) వక్రీభవన సూచిక
- ϵ_0 అనేది వాక్యూమ్ permitటివిటీ
- x_{vc} ఇది ఒక "మాతృక మూలకం", దీని పొడవు మరియు విలక్షణ విలువ యొక్క ప్రమాణాలు పరిమాణం యొక్క అదే క్రమాన్ని కలిగి ఉంటాయి జాలిక స్థిరాంకం.

ఈ సూత్రం బ్యాండ్ గ్యాప్ కంటే ఫోటాన్ శక్తి పెద్దది కాని చాలా పెద్దది కాని చాలా పెద్దది కాని చాలా పెద్దది కాదు (మరింత నిర్దిష్టంగా, ఈ సూత్రం బ్యాండ్లు సుమారు పారాబోలిక్ అని భావిస్తుంది), మరియు ప్రశ్నార్థకమైన బ్యాండ్-టు-బ్యాండ్ శోషణ కాకుండా ఇతర అన్ని శోషణ వనరులను విస్మరిస్తుంది, అలాగే కొత్తగా సృష్టించబడిన ఎలక్ట్రాన్ మరియు రంధ్రం మధ్య విద్యుత్ ఆకర్షణ (చూడండి). ఎక్సిటాన్). ప్రత్యక్ష పరివర్తన విషయంలో కూడా ఇది చెల్లదు. నిషిద్ధ, లేదా అనేక వేలెన్స్ బ్యాండ్ రాష్ట్రాలు ఖాళీగా లేదా వాహక బ్యాండ్ రాష్ట్రాలు నిండిన సందర్భంలో.[3]

మరోవైపు, పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ కోసం, ఫార్ములా:[3]

$$\alpha \propto \frac{(h\nu - E_{\text{g}} + E_{\text{p}})^2}{\exp(\frac{E_{\text{p}}}{kT}) - 1} + \frac{(h\nu - E_{\text{g}} - E_{\text{p}})^2}{1 - \exp(-\frac{E_{\text{p}}}{kT})}$$

ఎక్కడ:

- E_{p} అనేది దాని యొక్క శక్తి ఫోనాన్ ఇది పరివర్తనకు సహాయపడుతుంది
- k is బోల్ట్జ్ మన్ యొక్క స్థిరాంకం
- T అనేది ఉష్ణగతిక ఉష్ణోగ్రత

(ఈ సూత్రం పైన పేర్కొన్న అదే అంచనాలను కలిగి ఉంటుంది.)

అందువలన, ఒక ప్లాట్ అయితే $h\nu$ వర్సెస్ α^2 ఒక సరళరేఖను ఏర్పరుస్తుంది, ఇది సాధారణంగా ఒక ప్రత్యక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ ఉందని ఊహించవచ్చు, దీనిని సరళరేఖకు విస్తరించడం ద్వారా కొలవవచ్చు. $\alpha = 0$ అక్షం. మరోవైపు, ఒక ప్లాట్ అయితే.. $h\nu$ వర్సెస్ $\alpha^{1/2}$ సరళరేఖను ఏర్పరుస్తుంది, ఇది సాధారణంగా పరోక్ష బ్యాండ్ గ్యాప్ ఉందని ఊహించవచ్చు, సరళరేఖను సరళరేఖకు విస్తరించడం ద్వారా కొలవవచ్చు. $\alpha = 0$ అక్షం (ఊహించడం) $E_{\text{p}} \approx 0$).

క్రింది పట్టికలో కొన్ని సెమీకండక్టింగ్ మూలకాలు మరియు సమ్మేళనాలు వాటి బ్యాండ్గాప్లతో కలిపి 300 K వద్ద జాబితా చేయబడ్డాయి.

	ముఖ్యమైన	ప్రత్యక్ష/ పరోక్ష బ్యాండ్ గాప్	బ్యాండ్ గ్యాప్ ఎనర్జీ వద్ద 300 K (eV)
అంశాలు[మార్చు]	సి (వజ్రం) Ge Si Sn (బూడిద రంగు)	పరోక్ష పరోక్ష పరోక్ష సరాసరి	5.47 0.66 1.12 0.08
గ్రూపులు III-V సమ్మేళనాలు	GAAs InAs InSb పగులు GAN సత్రం	సరాసరి సరాసరి సరాసరి పరోక్ష సరాసరి సరాసరి	1.42 0.36 0.17 2.26 3.36 0.70
గ్రూపులు IV-IV సమ్మేళనాలు	α-ఎస్.ఐ.సి.	పరోక్ష	2.99
గ్రూప్ 2-6 సమ్మేళనాలు	ZnO CDSe ZnS	సరాసరి సరాసరి సరాసరి	3.35 1.70 3.68

The energy gap varies with temperature – due to a change in lattice constant.
This affects the band structure, which is sensitive to the lattice constant.

Density of states

Number of electronic states per unit energy range $(E, E+dE)$: $D(E)dE$

$D(E)$ – density of states.

In the effective mass approximation, $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

Number of states dN_{states} in the shell $(E, E+dE)$:

$$dN_{states} = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} dE$$

Taking into account spin, multiply by 2.

Get

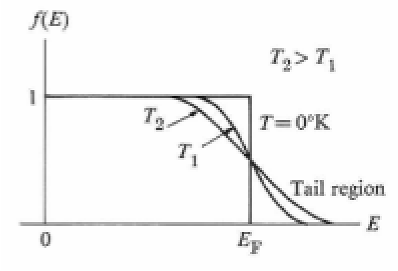
$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

Carrier concentration: intrinsic semiconductors

In order to determine the number of carriers, recall the Fermi-Dirac distribution function:

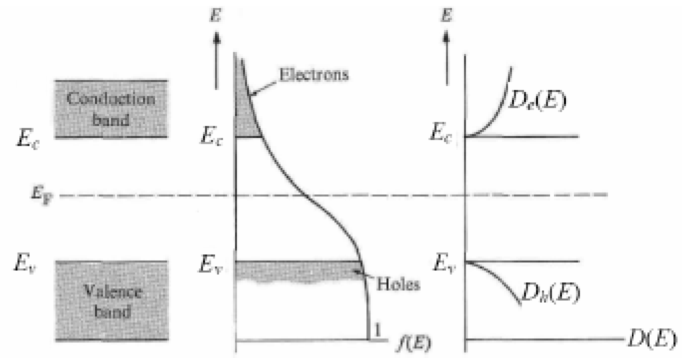
$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

- probability that an energy level E is occupied by an electron at T



Fermi level in intrinsic semiconductors lies close to the middle of the band gap.

The distribution function and the conduction and valence bands of a semiconductor:



The distribution function

Density of states for electrons and holes

First, calculate the concentration of electrons in the CB.

The number of states in the energy range $(E, E + dE)$ is equal to $D_e(E)dE$, where $De(E)$ - the density of electron states.

Each of these states has an occupation probability $f(E) \Rightarrow$ the number of electrons in this energy range is equal to $f(E)D_e(E)dE$.

The concentration of electrons throughout the CB is thus given by the integral over the conduction band: $n = \int_{E_c}^{\infty} f_e(E) D_e(E) dE$

$E_g \sim 1\text{eV} >> kT \Rightarrow$ can neglect the unity term in the denominator $F_e(E)$

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \quad \rightarrow \quad f_e(E) \approx e^{-(E-\mu)/k_B T}$$

The density of states for the conduction band is given by

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

substitute expressions for $f_e(E)$ and $D_e(E)$ into the integral, obtain

$$n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\mu/kT} \int_{E_c}^{\infty} (E-E_c)^{1/2} e^{-E/k_BT} dE$$

change the variable and use the result $\int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dE = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

get $n = 2\left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(\mu - E_c)/k_BT}$

Apply the same ideas to evaluate the number of holes in the VB.

The probability that a hole occupies a level E in this band is equal to $1-f_e(E)$, since $f_e(E)$ is the probability of electron occupation

Assuming that the Fermi level lies close to the middle of the band gap, i.e. $(\mu - E) >> k_BT$ we find for the distribution function of holes:

$$f_h(E) = 1 - \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1} = \frac{1}{e^{(\mu-E)/k_BT}+1} \approx e^{-(\mu-E)/k_BT}$$

The density of states for the holes is $D_h(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_h}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E_v - E)^{1/2}$

where E_v is the energy of the valence band edge.

Similarly to the way we did for electrons, can find for the concentration of holes in the valence band:

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} f_h(E) D_h(E) dE = 2\left(\frac{m_h kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(E_v-\mu)/k_BT}$$

For intrinsic semiconductors $n = p$

and $(m_e)^{3/2} e^{(\mu-E_c)/k_BT} = (m_h)^{3/2} e^{(E_v-\mu)/k_BT}$

Solve this for the Fermi energy: $\mu = \frac{E_v + E_c}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln\frac{m_h}{m_e}$

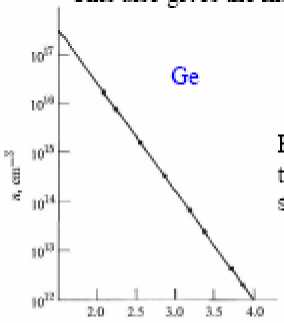
The second term is very small compared with the first → the Fermi level is close to the middle of the energy gap.

Substituting μ into the formula for n gives $n = 2\left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(\mu-E_c)/k_BT}$

$$n = 2\left(\frac{k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}(m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_BT}$$

where $E_g = E_c - E_v$ is the band gap.

This also gives the intrinsic hole concentration, since $n = p$.



n increases very rapidly - exponentially - with temperature

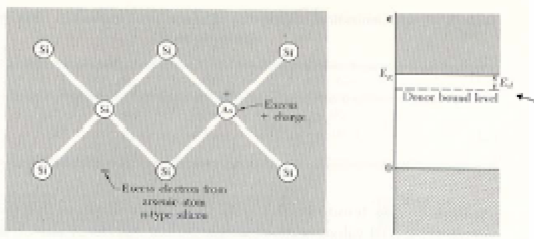
For Ge at room temperature $n \sim 10^{14}$ cm^{-3} - typical for intrinsic carrier concentration in semiconductors.

Intrinsic vs Extrinsic Semiconductors

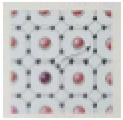
- Intrinisic semiconductors: the Fermi energy lies within the energy gap without altering the materials (valence band is completely filled at T = 0 K, for temperatures higher than this, electrons can be excited to the conduction band).
- Extrinsic semiconductors: we can add impurities to make a material semiconducting (or to change the properties of the gap)
- There are 2 types of extrinsic semiconductors: p-type and n-type (you many have heard of p-n junctions in electronics courses – these are based upon interfaces of p and n-type materials)
- These are materials which have mostly hole carriers (p) or electron carriers (n)
- These give you ways of modifying the band gap energies (important for electronics, detectors, etc)

Extrinsic semiconductors: n-type

- To see how this works, lets add a small amount of Arsenic (As: $4s^2 4p^3$) to Silicon (Si: $3s^2 3p^2$) (generally, a group V element to a group IV host)
- As replaces a Si atom, but it donates an electron to the conduction band (As is called the donor atom)
- This is an n-type semiconductor – more electrons around that can be mobile, and the Fermi energy is usually near the Conduction band
- At low temperatures, these extra electrons get trapped at the donor sites (no longer very mobile)



(diamond structure of Si)



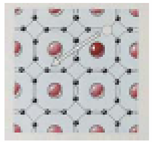
This creates some energy levels in the gap that can be occupied by electrons

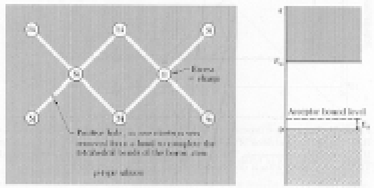
Extrinsic semiconductors: p-type

- The p-type semiconductors rely on a similar principle: now we are doping the lattice with ions that want to take electrons away (these are called acceptors), leaving mobile holes in the lattice
- An example: Doping Boron (B: $2s^2 2p$) into Si (Si: $3s^2 3p^2$). The Boron takes an extra electron so that it has the same bonding as Si, and leaves a hole in the lattice

Table 6 Acceptor ionization energies E_a of trivalent impurities in germanium and silicon, in meV

	B	Al	Ga	In
Si	45.	57.	65.	16.
Ge	10.4	10.2	10.8	11.2





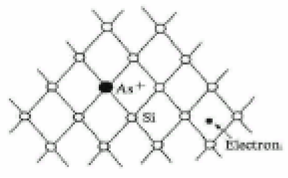
This creates holes in the lattice, which are these states near the valence band

Impurity states

Consider, for instance, a sample of Si, which has been *doped* by As

The As atom has five electrons while Si has valence 4.

4 of As electrons form the tetrahedral bonds with Si. The fifth electron cannot enter the bond, which is now saturated, and hence this electron detaches from the impurity.



Impurities that contribute electrons to the CB of the semiconductors are called *donors*.

Note that electrons have been created without the generation of holes.

We can calculate the binding energy by using the familiar Bohr model.

Must take into account the dielectric constant of the medium. Thus the coulomb potential is now given by

$$V(r) = -\frac{e^2}{\varepsilon r}$$

$\varepsilon = 11.7$ in Si

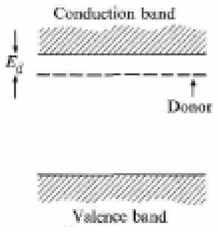
in the Bohr model, the binding energy is

$$E_d = -\frac{e^4 m_e}{2\varepsilon^2 \hbar^2}$$

(if $m_e = m_0$ and $\varepsilon = 1$, get $R_y = 13.6$ eV)

The binding energy of the donor is reduced by the factor $1/\varepsilon^2$ (usually ~0.01), and also by the mass factor m_e/m_0 (usually < 1).

The binding energy of these *shallow* donors is about 10^{-3} of R_y – agrees with experiment.



Extrinsic region:

For the common doping levels, about 10^{15} cm^{-3}, the number of carriers supplied by the impurities is large enough to change the intrinsic concentration appreciably at room temperature.

Two different types of extrinsic regions may be distinguished.

1) $N_d >> N_a$

In this case, to a good approximation, $n = N_d$

Hole concentration p is small. To calculate it, note that

$$n = 2\left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(E_F - E_g)/k_B T} \quad \text{and} \quad p = 2\left(\frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-E_F/k_B T}$$

are still valid even for doped sample (here $E_v = 0 \rightarrow E_c = E_g$)

$$\Rightarrow \quad np = 4\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-E_g/k_B T} = n_i^2 \quad \Rightarrow \quad p = \frac{n_i^2}{N_d}$$

$p << N_d = n$ *n-type* semiconductor

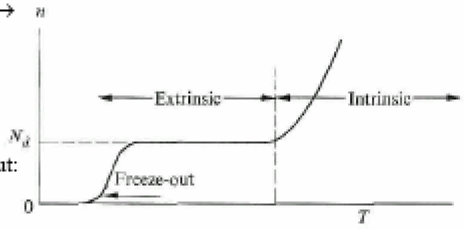
2) $N_a >> N_d$

In this case, $p = N_a$ n is small

Similarly get $n = \dfrac{n_i^2}{N_a}$ $n << N_a = p$ *p-type* semiconductor

Assumed temperature to be high enough so that all impurities are ionized - True at room temperature.

If the temperature is lowered, a point is reached at which the thermal energy becomes too small to cause electron excitation - electrons fall from the CB into the donor level → the conductivity diminishes dramatically - *freeze-out* – electrons are now "frozen" at their impurity sites.



The temperature of freeze-out: $E_d \sim k_B T \rightarrow T \sim 100$ K.

Electrical conductivity. Mobility

Both electrons and holes contribute to electric current.

Assume first that a sample is strongly n-type.

Conductivity in the free electron model: $\sigma_e = \dfrac{ne^2\tau_e}{m_e}$

Estimate the value for σ_e: $n = 10^{14}$ cm^{-3} (~10^{-8} of that in metals); $m_e = 0.1\, m_0$

$\rightarrow \sigma_e \sim 10^{-7}$ (μohm·cm)$^{-1}$ Typically, in metals $\sigma \sim 1$ (μohm·cm)$^{-1}$

σ in a semiconductor is still sufficiently large for practical applications

In semiconductor physics another transport coefficient is often used: ***mobility***

μ_e - *proportionality coefficient between the electron drift velocity and the applied electric field*: $|\mathrm{v}_e| = \mu_e E$

Taking into account that $\mathbf{j}_e = -en_e \mathbf{v}_e$ and $\mathbf{j}_e = \sigma_e \mathbf{E}$, we find that

$$\boxed{\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e}}$$

- mobility is a measure of the rapidity of the electron motion in the field.

express electrical conductivity in terms of mobility: $\sigma_e = ne\mu_e$

A typical value for μ_e: $\sigma_e = 10^{-7}$ (μohm·cm)$^{-1}$ and $n = 10^{14}$ cm^{-3}

$\rightarrow \mu_e \sim 10^3\, cm^2 V^{-1} s^{-1}$

Apply the above considerations to the case of holes in a strongly p-type substance. The conductivity of the holes is given by

$$\sigma_h = \frac{pe^2\tau_h}{m_h} = pe\mu_h$$ where μ_h is the hole mobility

General case (both electrons and holes are present):

When a field is applied, electrons drift opposite to the field and holes drift in the same direction as the field.

The currents of the two carriers are additive $\Rightarrow \sigma = \sigma_e + \sigma_h$

In terms of the mobilities: $\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$

is in the intrinsic region, $n = p$, $\Rightarrow \sigma = ne(\mu_e + \mu_h)$ where n is the intrinsic concentration

Carrier Diffusion

In general, total current in a semiconductor involves both electrons and holes (in the presence of both a concentration gradient and an electric field):

$$\vec{j}_n = ne\mu_n\vec{E} + eD_n\nabla n$$

$$\vec{j}_p = pe\mu_p\vec{E} - eD_p\nabla p$$

The second term in the above equations is the diffusion current (Fick's law). It arises from non-uniform carrier density.

In one dimension, for the negative carrier:

$$j_n = ne\mu_n E + eD_n\frac{\partial n}{\partial x}$$

At equilibrium, the drift and diffusion currents are equal:

$$j_n = 0 \Rightarrow 0 = ne\mu_n E + eD_n\frac{\partial n}{\partial x}$$

The Hall Effect

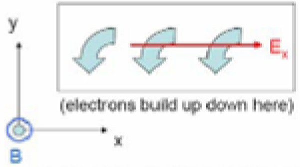
- Consider the motion of the electrons in the x, y, and z direction
- Initially: $v = (v_x, v_y, v_z)$, $E = (E_x, 0, 0)$, $B = (0, 0, B)$
- Apply the fields, and observe what happens

$$\vec{F} = m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v = -e\left(\vec{E}+\frac{1}{c}\vec{v}\times\vec{B}\right) \rightarrow m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_x = -e\left(E_x+\frac{1}{c}v_y B\right)$$

(net force in –x direction)

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_y = e\left(\frac{1}{c}v_x B\right)$$

(net force in the –y direction)



(electrons build up down here)

Initial state: electrons start to flow in the –y direction. This **creates** a field E_Y

We need to consider what happens after this initial electron drift to the bottom part of the metal slab

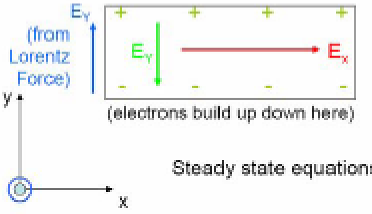
The Hall Effect

- The electrons will build up in the lower part of the metal, generating an electric field E_Y
- This will occur until the motion reaches a steady state – that is, when the forces are balanced in the y-direction (the Lorentz force from the magnetic field, and the Electric force from the build-up of the electrons will be equal and cancel eachother out)

Steady-state conditions: d/dt part = 0 → (forces are balanced)

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_x = -e\left(E_x+\frac{1}{c}v_Y B\right)$$

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_Y = -e\left(E_Y-\frac{1}{c}v_x B\right)$$



Steady state equations:

$$\rightarrow \frac{mv_x}{\tau} = -e\left(E_x+\frac{1}{c}v_Y B\right)$$

$$\rightarrow \frac{mv_Y}{\tau} = -e\left(E_Y-\frac{1}{c}v_x B\right)$$

The Hall Effect

- So, what happens is that we get a net flow of electrons in the x-direction, but we also get an electric field set up in the y-direction.
- Hall Effect measurements compare the ratio of the field created in the y-direction, to the current in the x-direction, and the magnetic field in the z-direction
- The Hall coefficient is defined by:

(from steady state solution)

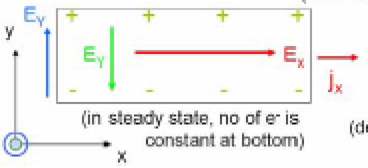
$$R_H = \frac{E_Y}{j_x B} = -\frac{eB\tau E_x/mc}{ne^2\tau E_x B/m} = -\frac{1}{nec} \quad \text{(CGS units)}$$

(from last lecture)

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad \text{(SI units)}$$

(electric charge)

(density of conduction electrons)



The Hall Effect

- Why is this an important measurement?
- It relates 3 simple, easily measured quantities (the current density, the electric field in y-direction, and the magnetic field in the z-direction) to the density of conduction electrons (which we can calculate)
- Also, it gives some strange results!
- In particular, R_H **changes signs for some materials!**
- Why?

Metal	R_H (exp)	No of carriers /atom	R_H (theory)
Li	-1.89	1 el.	-1.48
Na	-2.619	1 el.	-2.603
K	-4.946	1 el.	-4.944
Rb	-5.6	1 el.	-6.04
Cu	-0.6	1 el.	-0.82
Ag	-1.0	1 el.	-1.19
Au	-0.8	1 el.	-1.18
Al	1.136	1 hole	1.135
In	1.774	1 hole	1.780

Hall effect

We had $R_e = -\frac{1}{n_e e}$

analogously, if only holes are present, have $R_h = \frac{1}{n_h e}$

if both electrons and holes are present

$$R = \frac{R_e\sigma_e^2 + R_h\sigma_h^2}{(\sigma_e+\sigma_h)^2}$$

హాల్ ఎఫెక్ట్ : http://www.youtube.com/watch?v=_ATDraCQtpQ

http://www.youtube.com/watch?v=Hnnl9vefZmA

Electrons and holes

- The Hall Effect was an important experiment historically because it suggested that a carrier could have a positive charge
- These carriers are "holes" in the electron sea (and thus, being the absence of an electron, they have a net positive charge). These were first explained by Heisenburg.
- We can't explain why this would happen with our free electron theory (but it arises naturally in band theory)
- Note: the conditions we derived for the steady state can be invalid for several conditions (ie. when there is a distribution of collision times). But in general, it is a very powerful tool for looking at properties of materials

http://www.youtube.com/watch?v=5ZNeDxfgYAE అంతర్గత బాహ్య

ట్రాన్సిస్టర్ యొక్క పనితీరు

http://www.youtube.com/watch?v=IcrBqCFLHIY

http://www.youtube.com/watch?v=9CrcRabTQ0s

డి ఎలక్ట్రిక్ మెటీరియల్స్

http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/dielectrics/polarisation_mechanisms.php

Di Powers

http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/dielectrics/polarisation_mechanisms.php

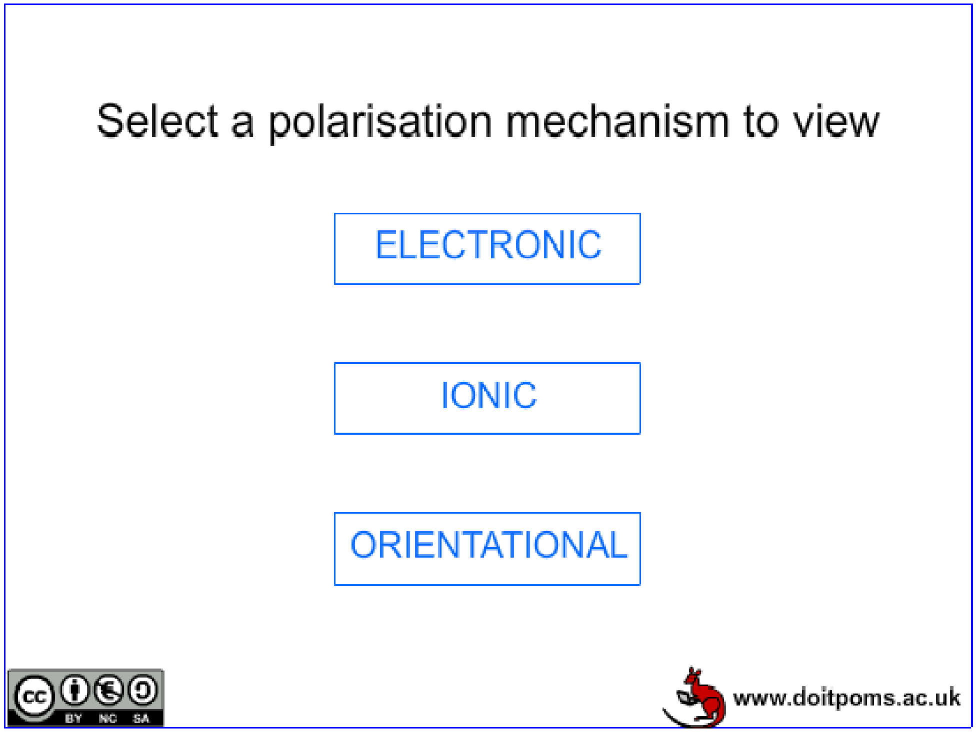
పీజో విద్యుత్ http://www.youtube.com/watch?v=Z3y5W5p7Ofg http://www.youtube.com/watch?v=b-8alopw-cc

http://www.youtube.com/watch?v=F1PzYi8jmuo&playnext=1&list=PLVX8QB5VXOXSMYNTCVJRHWVN5M-WOTEYR

http://www.youtube.com/watch?v=uO9myHr2cDQ

http://www.youtube.com/watch?v=RC3Cpxjx6H4&list=PL13DCA3EF0E29362C

There are three main polarisation mechanisms that can occur within a dielectric material: electronic polarisation, ionic polarisation (sometimes referred to as atomic polarisation) and orientational polarisation. The animation below illustrates how each of these mechanisms functions on the microscopic scale.



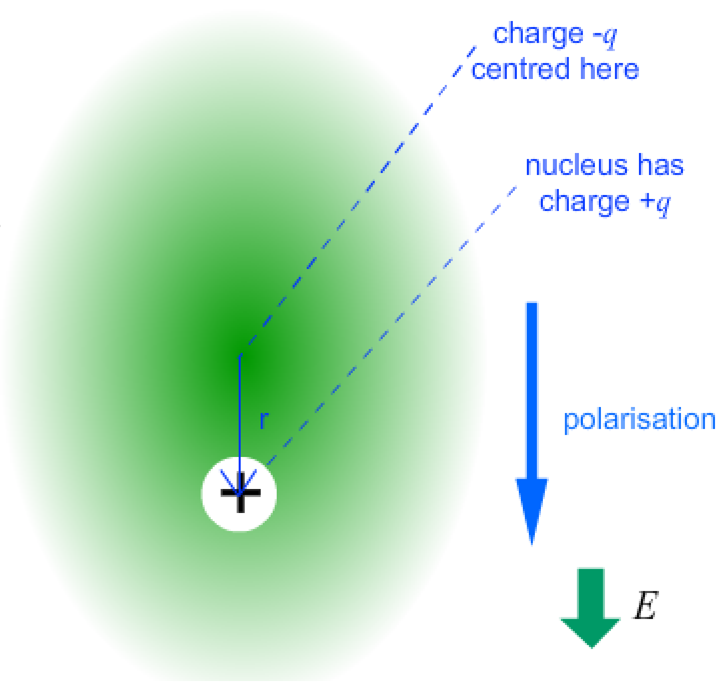
Note: This animation requires Adobe Flash Player 8 and later, which can be downloaded here.

All non-conducting materials are capable of electronic polarisation, which is why all insulators are dielectric to some degree. In contrast, the ionic and orientational modes are only available to materials possessing ions and permanent dipoles respectively.

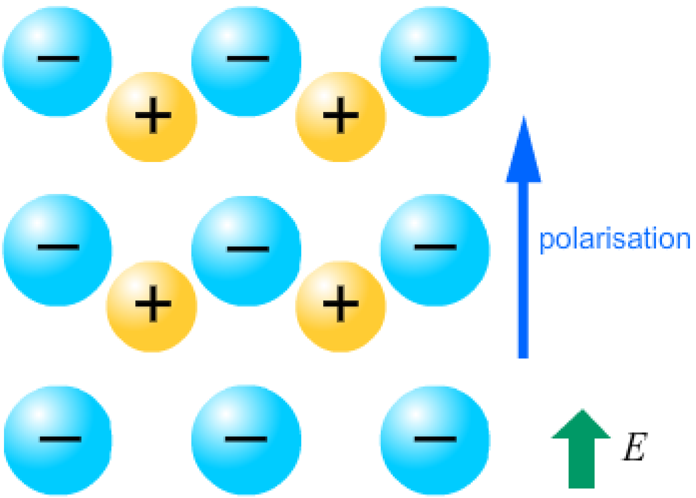
Another contribution to polarization is space charge, or the accumulation of mobile charges at structural surfaces and interfaces. Rather than being a direct property of a material this is only a feature of

The applied field causes the electron cloud to distort in one direction while the nucleus moves in the other direction. Since the centre of the electron cloud no longer coincides with the nucleus, a dipole moment develops.

$\mu = qr$



The distortion of bonds caused by the electric field leads to an off-centring of the cations with respect to the anions (and vice versa). The centres of positive and negative charge no longer coincide and a net polarisation develops.



Definition of fundamental quantities

In vacuum, $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$; $\mu_0 = 4\pi \times 10^{7}$ (SI units: $N{\cdot}A^{-2}$);

B – magnetic induction; **H** – magnetic field intensity

When a material medium is placed in a magnetic field, the medium is magnetized. This is described by the *magnetization vector* **M** - the magnetic dipole moment per unit volume.

$$\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H} + \mu_0\mathbf{M}$$

Magnetization is induced by the field ⇒ assume that **M** is proportional to **H**:

$\mathbf{M} = \chi\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{B} = \mu_0(1+\chi)\mathbf{H}$ or $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$; $\mu = \mu_0(1+\chi)$; $\mu_r = 1 + \chi$

χ - *magnetic susceptibility* of the medium (no physical relationship to the electric susceptibility).

Real crystals are anisotropic, and the susceptibility is represented by a second-rank tensor.

For simplicity, we shall ignore anisotropic effects.

We assumed that **M** is proportional to **H**, the external field - ignored such things as demagnetization field, which were included in the electric case.

This is justifiable in the case of paramagnetic and diamagnetic materials because **M** is very small compared to **H** (typically $\chi = M/H \sim 10^{-5}$), unlike the electric case, in which $\chi \sim 1$.

But when we deal with ferromagnetic materials, where **M** is quite large, the above effects must be included.

Note also that χ can be dependent on the applied magnetic field.

In this case, we can define the magnetic susceptibility as follows:

$$\chi = \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{H}}$$

The magnetization can be defined as $\mathbf{M} = -\dfrac{\partial E}{\partial \mathbf{H}}$

where E is the total energy of the system. These definitions are more general.

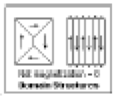
Classification of materials

All magnetic materials may be grouped into three magnetic classes, depending on the magnetic ordering and the sign and magnitude of the magnetic susceptibility:

• *diamagnetics*: the magnetic susceptibility is negative - the magnetization is opposite to the applied magnetic field. Usually its magnitude is ~ -10^{-6} to -10^{-5}. In diamagnetic materials the susceptibility nearly has a constant value independent of temperature. Example: Ionic crystals and inert gases.

• *paramagnetics*: χ is positive, i.e. **M** is parallel to **H**. The susceptibility is also very small: 10^{-4} to 10^{-5}. The best-known examples of paramagnetic materials are the ions of transition and rare-earth ions.

• *ferromagnetics*: very large positive χ (e.g. 10^5), spontaneous magnetization below a certain temperature. Will discuss later, as well as *antiferromagnetics* and *ferrimagnetics*



Magnetism of a free atom

1. spins of electrons S

2. orbital momentum of electrons around the nucleus L

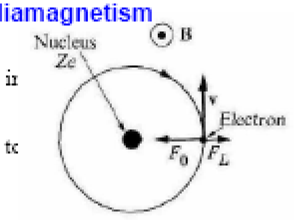
3. A change of the orbital momentum caused by the external magnetic field

paramagnetism: 1 and 2 (positive contribution)

diamagnetics: 3 (negative contribution)

Classical consideration: diamagnetism

Can obtain the same formula classically:



Consider an electron rotating about the nucleus in a circular orbit; let a magnetic field be applied.

Before this field is applied, we have, according to Newton's second law,

$$F_0 = m\omega_0^2 r$$

F_0 is the attractive Coulomb force between the nucleus and the electron, and ω_0 is the angular velocity.

Applied field → an additional force: the *Lorentz force* $F_L = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$

$$F_r = -eB\omega r \Rightarrow F_0 - eB\omega r = m\omega^2 r \qquad \omega = \omega_0 - \frac{eB}{2m}$$

Reduction in frequency → corresponding change in the magnetic moment.

The change in the frequency of rotation is equivalent to the change in the current around the nucleus: ΔI = (charge) × (revolutions per unit time)

http://www.youtube.com/watch?v=QgwReDkpq6E (అయస్కాంత డొమైన్ లు)

http://www.youtube.com/watch?v=85dIRfKMlwM (ఆల్టర్నేటింగ్ మాగ్ ఫీల్డ్ లో)

http://www.youtube.com/watch?v=szzCha0ot8U (ఎక్స్చేంజ్ కూపింగ్)

http://www.youtube.com/watch?v=f3BNHhfTsvk (మ్యాగ్ స్టోరేజ్ పరికరం)

http://www.youtube.com/watch?v=28Xe4FCCjt4 భూమి యొక్క మాగ్ ఫీల్డ్ మరియు ఎలక్ట్రాన్ ల యొక్క భ్రమణం

ferro mag

మాగ్నెటిక్ లెవీ : http://www.youtube.com/watch?v=nWTSzBWEsms

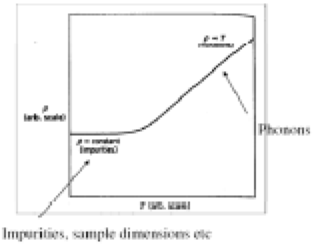
http://www.youtube.com/watch?feature=endscreen&v=L1awpgqmzsk&NR=1

http://www.youtube.com/watch?NR=1&feature=endscreen&v=GHtAwQXVsuk

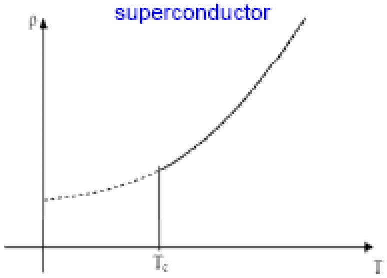
Superconductivity is a phenomenon occurring in certain materials at low temperatures, characterized by exactly zero electrical resistance

Discovered in 1911 by Heike Kamerlingh Onnes - the resistance of solid mercury abruptly disappeared at the temperature of 4.2 K

normal metal



superconductor



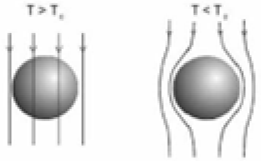
$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau}$$

zero ρ means there are some electrons with infinite τ – *no scattering*

Superconductivity

- In a superconductor, the currents effectively run forever – there are no collisions to slow them down (measurements by File and Mills suggest that the decay time of a supercurrent through a solenoid is no less than 100 000 years)
- Another odd property of superconductors:

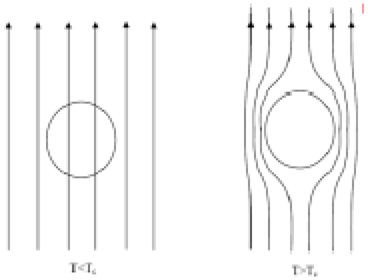
  The Meissner Effect
- If a superconducting sample is cooled in a small magnetic field, the magnetic field lines will be expelled from the sample (due to the supercurrents forming in a direction to oppose the field, and therefore the field inside the superconductor is zero)



Perfect diamagnetism

Second basic property of superconductors – they expel magnetic field completely when in superconducting phase ($T<T_c$).

This phenomenon is called ***the Meissner effect***.



$$\boldsymbol{B} = \mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M}) = 0$$

$$\chi = \frac{M}{H} = -1$$

Distinguishes the superconductor from an ideal but normal conductor, for which $dB/dt = 0$

Could explain the expulsion of the flux if a S/C is moved into a magnetic field → motion of metal produces currents, which do not decay because $R = 0$

However, $R = 0$ does not explain the flux expulsion when a S/C is already in a magnetic field and is cooled from its normal to S/C state (through T_c)

Magnetic properties: type I superconductors

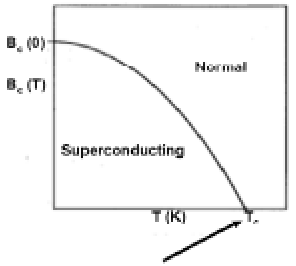
Superconductors are divided into 2 types, depending on their behavior in a magnetic field.

All superconducting elements are type I, except Nb

Superconductivity is destroyed by the presence of some magnetic field, ***the critical field***, B_c.   Typically B_c ~ tens of mT for type I

$$B_c(T) = B_c(0)\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$$

B-T phase diagram



Critical field goes to zero as T→T_c

Field B_c does not need to be external:

Critical current I_c causes a magnetic field B_c, which destroys superconductivity

Penetration depth

Surface currents expel magnetic flux from type I superconductors

Currents actually penetrate the sample slightly (~ 100 nm)

Magnetic field decreases exponentially inside sample:

$$B(x) = B_o\, e^{-x/\lambda} \qquad \lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{\sqrt{1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^4}}$$

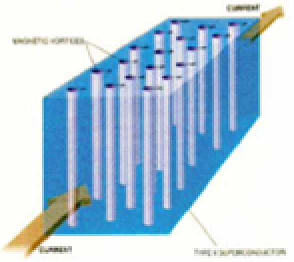
As $T \to T_c$, λ increases and B penetrates deeper into the sample.

At T_c, $\lambda \to \infty$, and the sample goes normal

Type I and Type II Superconductors

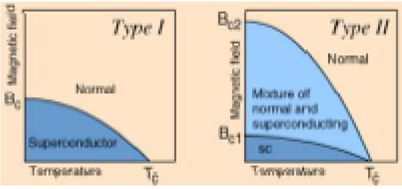
- Type I superconductor: A field can be applied to some maximum value before it becomes "normal". The field does not penetrate the superconductor (Meissner effect). Most metals belong to this class (eg. Zn, V, Ti)
- Type II superconductor: A field can be applied up to a critical value, H_{C1}, where the field lines penetrate the sample. This is known as the vortex state. After the field is increased to H_{C2}, the material is no longer superconducting. These are the "high-T_c" superconductors, like $YBa_2Cu_3O_7$.

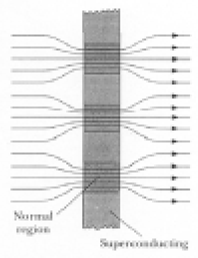
Penetration of magnetic field lines in a type II superconductor

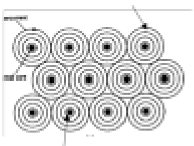


Type II superconductors

- Alloys (and Nb and V)
- Higher T_C, B_C, I_C than type I
- More applications e.g.Nb_3Sn magnets
- 2 critical fields:
  $B < B_{C1}$ - just like a type I
  $B > B_{C2}$ - normal
  Intermediate fields – sample has both superconducting and normal regions

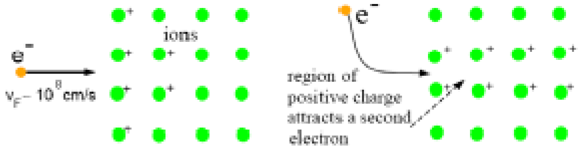






BCS theory

- Fröhlich (1950): e-e attraction via phonons (…. Isotope effect)
- Cooper (1956): electrons just above the Fermi surface form bound pairs
- Most stable when center of mass is at rest and total spin = 0, So, $+k\uparrow$ and $-k\downarrow$
- Attractive interaction is provided by lattice vibrations – phonons
- First electron deforms the lattice and second electron is then attracted by the deformation (i.e. the changed positive charge distribution)



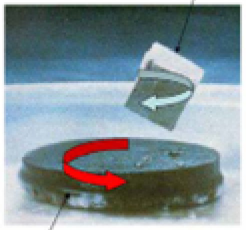
- Time-scales: electron motion ~ 10^{-16} s; lattice deformed for ~10^{-13} s
  In this time, first electron has traveled $\sim v_F \tau \sim 10^6 ms^{-1} \times 10^{-13} s \sim 1000 Å$

Lattice deformation attracts 2nd electron without it feeling the Coulomb repulsion of the 1st

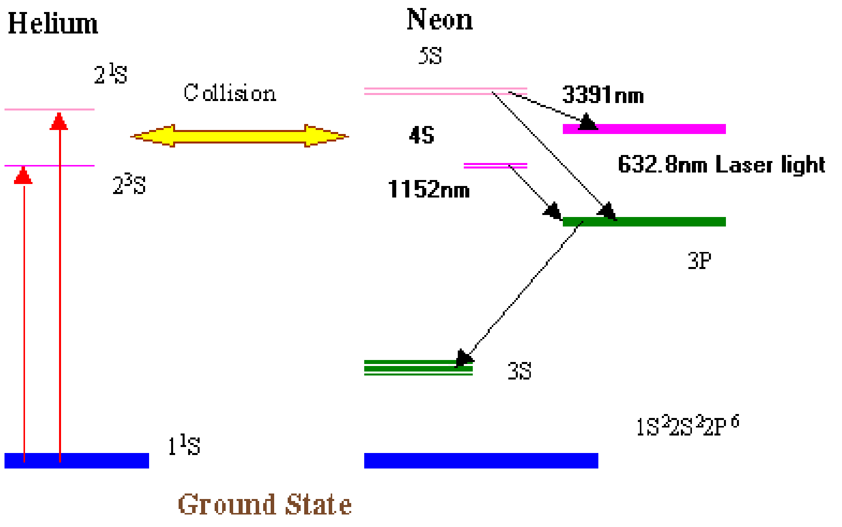
Magnetic Levitation

- This is what causes the levitation of magnets above superconducting samples (the supercurrents form to counterbalance the magnetic force, and when the forces are equal and opposite, the magnet floats)
- Potential application: levitation of magnetic trains (no friction)

Electrons in magnet, which create a fixed magnetic field



Superconducting electrons in sample
(in a direction which counters the magnet to expel the magnetic field)



http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/5/54/Laser%2C_quantum_principle.ogv (లాసింగ్ యాక్షన్)

---

http://www.youtube.com/watch?v=C23cRCZ2J98 (లేజర్ ఉత్పత్తి NSG)

http://www.youtube.com/watch?v=yQ0lMSNuj_o (రూబీ) http://www.youtube.com/watch?v=oUEbMjtWc-A (ఎల్ఏఎస్ ఎలా పనిచేస్తుంది)
http://www.youtube.com/watch?v=48WkYbkhJO4 (ఎల్ఏఎస్ ఎలా పనిచేస్తుంది 2)

బాహ్య మరియు అంతర్గత http://www.youtube.com/watch?v=5ZNeDxfgYAE

http://www.youtube.com/watch?v=FAc5bXX4qog సెమీ కండక్టింగ్ లేజర్

లేజర్ అప్లికేషన్ http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/lascool1.html

http://www.ph.unimelb.edu.au/~scholten/opticshome/lasercool/lasercool.html

http://www.learner.org/courses/physics/visual/animation.html?shortname=PHY05_laser_cooling

లేజర్ అబ్లేషన్

మందు

వైద్యంలో, అబ్లేషన్ అనేది ఒక భాగాన్ని తొలగించడంతో సమానం. జీవ కణజాలం, సాధారణంగా దీని ద్వారా శస్త్రచికిత్స. ఉపరితల అబ్లేషన్[మార్చు] తోలు (dermabrasion, దీనిని రీసర్ఫేసింగ్ అని కూడా పిలుస్తారు ఎందుకంటే ఇది ప్రేరేపిస్తుంది పునరుత్పత్తి) రసాయనాల ద్వారా (పీలింగ్ కు కారణమయ్యేవి) లేదా లేజర్ల ద్వారా నిర్వహించవచ్చు. దీని ఉద్దేశం చర్మపు మచ్చలను తొలగించడం, ముసలి చర్మం, ముడతలుఅందుకని పునరుత్తేజం ఇది. ఉపరితల అబ్లేషన్ కూడా దీనిలో ఉపయోగించబడుతుంది ఓటోలారిన్జాలజీ అనేక రకాల శస్త్రచికిత్సల కోసం, గురకపెట్టు. గుండెపై రేడియో ఫ్రీక్వెన్సీ తరంగాలను ఉపయోగించి అబ్లేషన్ థెరపీని వివిధ రకాల కార్డియాక్ అరిథ్మియాను నయం చేయడానికి ఉపయోగిస్తారు:సుప్రావెంట్రిక్యులర్ టాచీకార్డియా, వోల్ఫ్-పార్కిన్సన్-వైట్ సిండ్రోమ్ (WPW), వెంట్రిక్యులర్ టాచీకార్డియా, మరియు ఇటీవల కర్ణిక ఫైబ్రిలేషన్ నిర్వహణ. ఈ పదాన్ని తరచుగా ఈ సందర్భంలో ఉపయోగిస్తారు లేజర్ అబ్లేషన్, ఒక ప్రక్రియ లేజర్ ఒక పదార్థం యొక్క ద్రవాన్ని కరిగిస్తుంది పరమాణు బంధాలు. కణజాలాలను, శక్తి సాంద్రతను తగ్గించడానికి లేజర్ కోసం లేదా సరళత[మార్చు] ఎక్కువగా ఉండాలి, లేకపోతే థర్మోకోగ్యులేషన్ సంభవిస్తుంది, ఇది కణజాలం యొక్క ఉష్ణ ఆవిరి.

రోటోబ్లేషన్ అనేది ఒక రకమైన ధమనుల ప్రక్షాళన, ఇది కొవ్వు నిక్షేపాలు లేదా ఫలకాన్ని తొలగించడానికి ప్రభావిత ధమనిలోకి ఒక చిన్న, వజ్రం-టిప్డ్, డ్రిల్ లాంటి పరికరాన్ని చొప్పించడం. చికిత్సలో ఈ విధానాన్ని ఉపయోగిస్తారు కొరోనరీ హార్ట్ డిసీజ్ రక్త ప్రవాహాన్ని పునరుద్ధరించడానికి.

రేడియో ఫ్రీక్వెన్సీ అబ్లేషన్ (ఆర్ఎఫ్ఎ) అనేది తక్కువ ఇన్వాసివ్ విధానాల ద్వారా శరీరం లోపలి నుండి కణజాలాన్ని తొలగించే పద్ధతి. అనగా, ఒక ఆర్.ఎఫ్.ఎ.ఎలక్ట్రోఫిజియాలజీ అధ్యయనం అరిథ్మియాకు దారితీసే అసాధారణ విద్యుత్ కార్యకలాపాలను విడుదల చేసే కణాలను తొలగించడానికి.

ఎముక మజ్జ అబ్లేషన్ అనేది మానవ ఎముక మజ్జ కణాలను తొలగించే ఒక ప్రక్రియ. ఎముక మజ్జ మార్పిడి. ఇది అధిక-తీవ్రతను ఉపయోగించి నిర్వహించబడుతుంది కీమోథెరపీ మరియు మొత్తం శరీర రేడియేషన్. అందుకని, ఈ వ్యాసం యొక్క మిగిలిన భాగంలో వివరించిన ఆవిరి పద్ధతులతో దీనికి సంబంధం లేదు.

మెదడు కణజాలం యొక్క అబ్లేషన్ కొన్నింటికి చికిత్స చేయడానికి ఉపయోగిస్తారు నాడీ సంబంధిత రుగ్మతలుప్రత్యేకించి పార్కిన్సన్ వ్యాధి, మరియు కొన్నిసార్లు మానసిక రుగ్మతలు అలాగే..

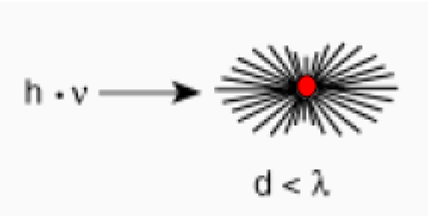
ఇటీవల, కొంతమంది పరిశోధకులు జన్యు అబ్లేషన్తో విజయవంతమైన ఫలితాలను నివేదించారు. ముఖ్యంగా, జన్యు అబ్లేషన్ అనేది అవాంఛిత కణాలను తొలగించడానికి మరింత సమర్థవంతమైన పద్ధతి, అవి: కంతి కణాలు, ఎందుకంటే నిర్దిష్ట కణాలు లేని పెద్ద సంఖ్యలో జంతువులు ఉత్పత్తి కావచ్చు. జన్యుపరంగా అబ్లేటెడ్ రేఖలను ఎక్కువ కాలం కొనసాగించవచ్చు మరియు పరిశోధనా సంఘంలో పంచుకోవచ్చు. కొలంబియా యూనివర్శిటీ పరిశోధకుల నివేదిక caspases సి. ఎలిగెన్స్ మరియు మానవుల నుండి కలిపి, ఇవి అధిక స్థాయి లక్ష్య నిర్దిష్టతను నిర్వహిస్తాయి. వివరించిన జన్యు అబ్లేషన్ పద్ధతులు క్యాన్సర్తో పోరాడటానికి ఉపయోగపడతాయి.[4]

ఆప్టికల్ ఫైబర్స్

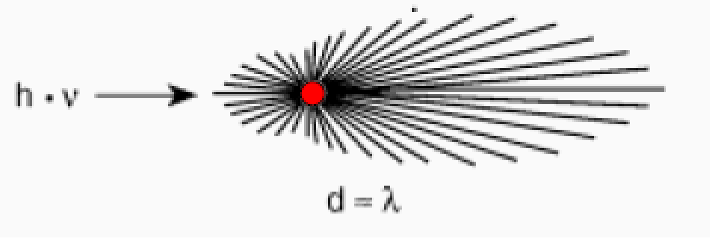
http://www.youtube.com/watch?v=0MwMkBET_5I

ఎలా తయారు చేయబడతాయి http://www.youtube.com/watch?v=6CqT4DuAVxs

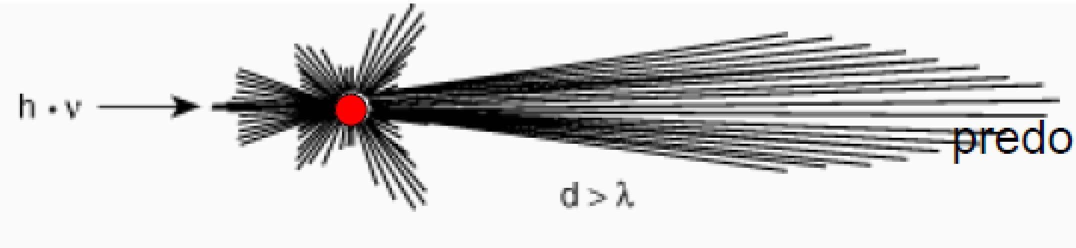
Rayleigh- and Mie-Scattering



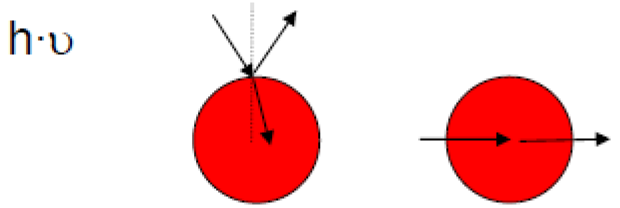
d < λ: Rayleigh-Scattering
isotropic distribution



d = λ: Mie-Scattering
in forward and backward directions



d > λ: Mie-Scattering
predominantly in forward direction



d >> λ: Mie-Theory approaches laws of geometric optics

Quelle: RÖMPP on line

© F.C. Jentoft FHI Berlin 2008

నానో టెక్నాలజీ http://www.youtube.com/watch?v=g_IaVepNDT4

నానో టెక్నాలజీ యొక్క శక్తి http://www.youtube.com/watch?v=mEH6tDLKcVU

Quantum dot http://www.youtube.com/watch?v=B195U--HI8A

http://www.youtube.com/watch?v=1QmMgQBfjD8

http://www.youtube.com/watch?v=x_tNzeouHC4

http://www.youtube.com/watch?v=uqamjc4VKfs

CVD http://www.youtube.com/watch?v=vUoEciqOfx8 http://www.youtube.com/watch?v=iJePZAv3nrs

పివిడి http://www.youtube.com/watch?v=dpwIswozTdw

ఫిజిక్స్ ల్యాబ్ సిమ్యులేషన్స్

1. పట్టకం యొక్క పదార్థం యొక్క వ్యాప్తి శక్తి - స్పెక్ట్రోమీటర్.

http://www.optics.arizona.edu/jcwyant/Geometry/Dispersion.htm

http://www.physics.uoguelph.ca/applets/Intro_physics/kisalev/java/dispprizm/index.html

http://www.edumedia-share.com/media.php?id=476

http://www.mtholyoke.edu/~mpeterso/classes/phys103/geomopti/MinDev.html

http://www.tutorvista.com/content/physics/physics-iv/optics/prism-applications.php

2. వక్రత యొక్క వ్యాసార్థం Plano కన్వెక్స్ లెన్స్ - Newton'రింగ్..

http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/index.php?topic=1433.0

http://webphysics.davidson.edu/physlet_resources/bu_semester2/c26_newtons_rings.html

3. p-n-జంక్షన్ యొక్క మెటీరియల్ యొక్క ఎనర్జీ గ్యాప్.

   http://www-g.eng.cam.ac.uk/mmg/teaching/linearcircuits/diode.html

   http://www.standrews.ac.uk/~www_pa/Scots_Guide/info/comp/passive/diode/diode.htm

4. తీగ యొక్క దృఢత్వ మాడ్యూల్స్ - టోర్సియోనల్ పెండ్యులం.

   http://www.upscale.utoronto.ca/IYearLab/Intros/TorsionPend/TorsionPend.html

   http://www.upscale.utoronto.ca/IYearLab/torspend.pdf

5. ఒక మూలం యొక్క తరంగాల పొడవును నిర్ణయించడం - డిఫ్రాక్షన్ గ్రేటింగ్.

   http://www.matter.org.uk/schools/Content/Interference/gratings.html

   http://www.matter.org.uk/schools/Content/Interference/gratingExplored.html

6. ట్రాన్స్వర్స్ మరియు లాంగిట్యూడినల్ మోడ్లు - మెల్డ్ యొక్క ప్రయోగం.

   http://www.kw.igs.net/~jackord/bp/n1.html **(పీకబెట్టిన తీగ)**

   http://ta.wikipedia.org/wiki/Melde's_experiment **(నోడ్స్ మరియు యాంటీ నోడ్స్)**

   http://www.as.ysu.edu/~mcrescim/1502/116t/meldeslab.html **(అలంకారాత్మకం)**

   http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/waves/string.html

   http://www.falstad.com/loadedstring/ **(లోడెడ్ స్ట్రింగ్)**

   https://www.facebook.com/video/video.php?v=1916139230189

7. ఆప్టికల్ ఫైబర్ లో న్యూమరికల్ అపెర్చర్ మరియు నష్టాల మూల్యాంకనం.

   http://webphysics.davidson.edu/physlet_resources/optics4/fiber_optics.html

8. R-C సర్క్యూట్ యొక్క సమయ స్థిరాంకం.

http://www.ngsir.netfirms.com/englishhtm/RC_dc.htm

http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/index.php?topic=31

http://www.ac.wwu.edu/~vawter/PhysicsNet/Topics/DC-Current/RCSeries.html

ఇబ్బందిని నివారించడం కొరకు డౌన్ లోడ్ అవసరం అవుతుంది

XRD

http://www.youtube.com/watch?v=PAjKTAyaMKY

http://www.youtube.com/watch?v=B99Sd1MQPkY

++ http://www.youtube.com/watch?v=_aOU7BY56Kg

http://www.youtube.com/watch?v=o5RONSDQRao

టాపిక్ SEM (http://www.seallabs.com/hiw8.htm

http://www.youtube.com/watch?v=bfSp8r-YRw0

http://www.youtube.com/watch?v=sFSFpXdAiAM

TEM http://www.youtube.com/watch?v=fToTFjwUc5M

http://www.youtube.com/watch?v=fxEVsnZT8L8