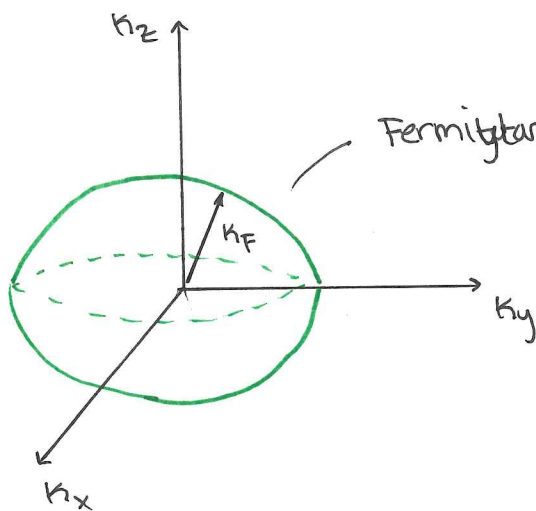


Def. Fermiyta

- yta i \bar{k} -rummet som separerar tomma från fulla tillstånd vid $T=0$

↳ viktigt för metaller!

För fria elektroner:I en kristall:

energilband $\epsilon_{\vec{k},n}$ $\left\{ \begin{array}{l} k: \text{gittervagn} \\ n: \text{bandindex} \end{array} \right.$

Fermiytan: $\epsilon_{\vec{k},n} - \epsilon_F = 0 \Rightarrow$ yta i \bar{k} -rummet!

En yta per band ($n=1, 2, 3, \dots$)

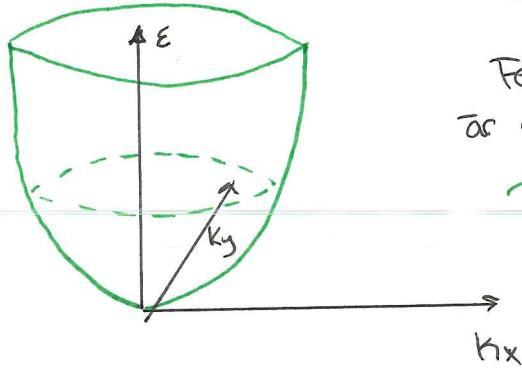
I 2D:

Utgå från svag potential \rightleftharpoons tomma gittermodellen

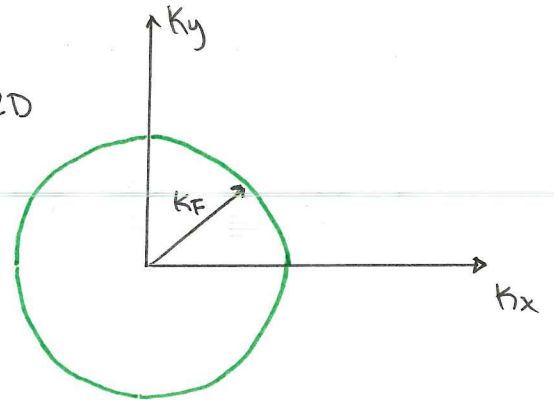


Ex. 2D + kvadratisk gitter

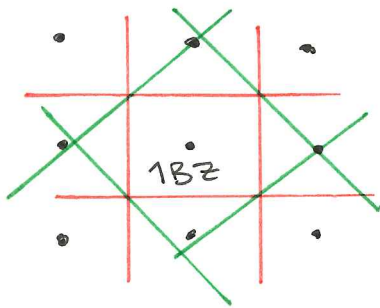
Utgå från frielektron $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$



Fermiyta som är en kurva i 2D



Med gitter (receptat gitter $\bar{G}_{hk} = \frac{2\pi}{a} (h, k)$)



Brillouin zoner?

(1BZ → den röda!)

Hur stor är k_F givet att vi har n_{valens} elektroner per atom?

↳ i 3D: $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$, $n = \frac{N_{\text{atom}} \cdot n_{\text{valens}}}{V}$

↳ i 2D: tillstånd innanför k_F : $\underbrace{\pi k_F^2}_{\text{tätet i } k\text{-rummet}} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot \underbrace{2}_{\text{spin}} = (1)$

Antal elektroner: $N_{\text{atom}} \cdot n_{\text{valens}} = \left(\frac{L}{a}\right)^2 n_{\text{valens}} \quad (2)$

Sätt (1) = (2)!

↳ $\pi k_F^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot 2 = \left(\frac{L}{a}\right)^2 \cdot n_{\text{valens}}$

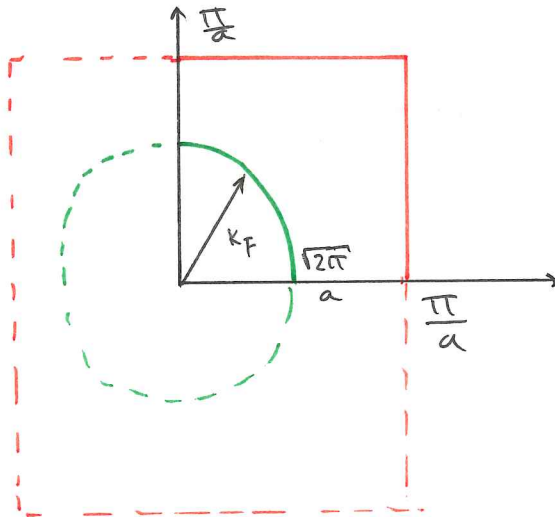
→ $k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} (n_{\text{valens}})^{\frac{1}{2}}$

Antag 1 elektron per atom:

$$n_{\text{valens}} = 1$$

$$k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} < \frac{\pi}{a}$$

{ stoppa fria ytan på reciproka gitteret }



ytan är långt ifrån
BZ kantar (Bragg-plan)

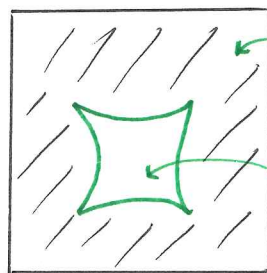
↳ påverkas endast lite av
svag potential!

Antag istället $n_{\text{valens}} = 5$ (5 elektroner per atom!)

$$k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} (5)^{\frac{1}{2}} \approx 0.89 \frac{2\pi}{a} > \frac{\pi}{a} \left(< \frac{2\pi}{a} \right)$$

↳ Fria sfären ligger nu utanför 1BZ!

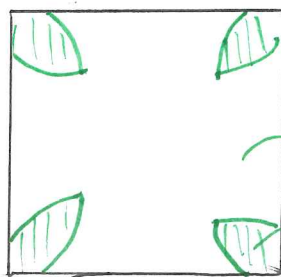
Beskriv i 1BZ genom att translatera med \vec{G} till



fullt!
lägre energier

tomt!
högre energier

{ Fermiytan för
2a bandet! }

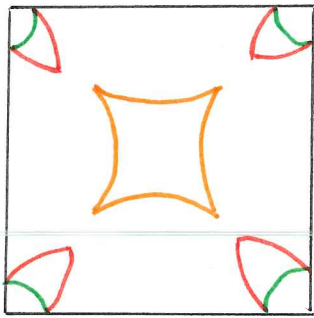


tomt

fullt

{ Fermiytan för
3e bandet! }

Totala Fermiytan är ~~se~~ bidragen från alla band:



Fermiytan består av
3 band i det här fallet!

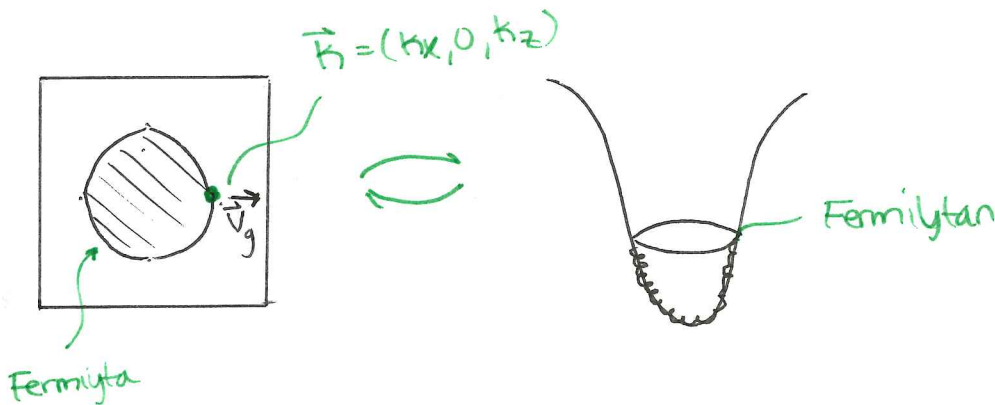
Elektroniska ytor, hållika ytor

Bara: en kurva längs med Fermiytan

↳ En bara är **elektronisk** om en elektron ^{i banan} rör sig som en elektron, dvs en negativt laddad partikel

↳ En bara är **hållik** om elektronen rör sig som en positivt laddad partikel

2D:



Betrakta en partikel på Fermiytan i ett magnetfält $\hat{B} = B\hat{z}$

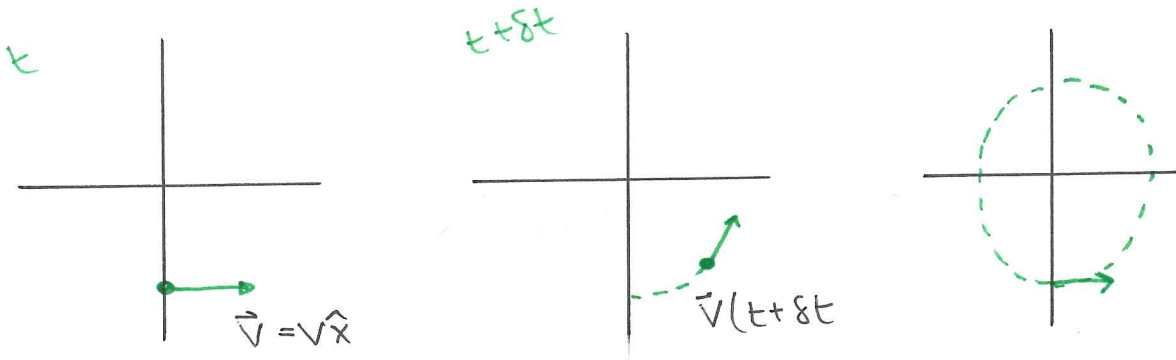
$$\{\text{Pörelsekv.}\} \quad \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B}$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} = \left\{ \epsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \right\} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$$

$$\text{Om } \vec{k} = (k_x, 0, k_z) \Rightarrow -e\vec{v} \times \vec{B} \sim -e \frac{\hbar}{m^*} [k_x \hat{x} + k_z \hat{z}] \times \hat{z} B \quad (\hat{z} \times \hat{z} = 0)$$

$$\hat{y} = \frac{e\hbar k_x B}{m^*} \hat{y}, \quad \frac{dk}{dt} \sim \hat{y}$$

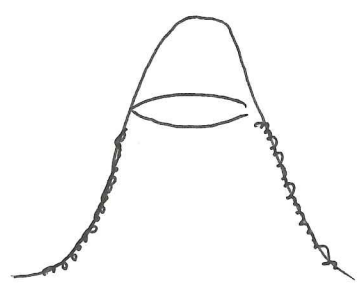
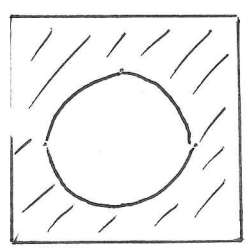
I reella rummet:



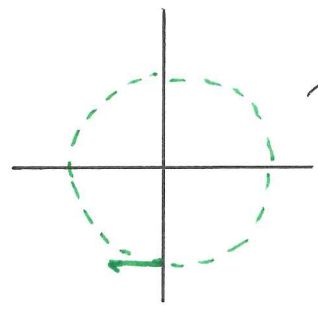
Bana i reella rummet, som en elektron $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$
 dvs elektronlik bana

Obs! Eftersom B-fält inte gör arbete måste partikeln röra sig på Fermiytan

om istället hållik bana:



Reella rummet:

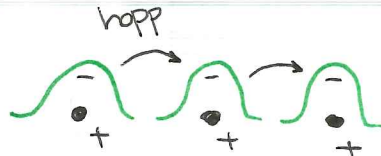


rör sig som en positivt laddad partikel!

Beräkna Fermiytor

↳ Svag potential, utgå från frielektron

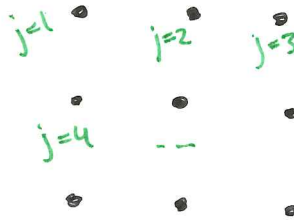
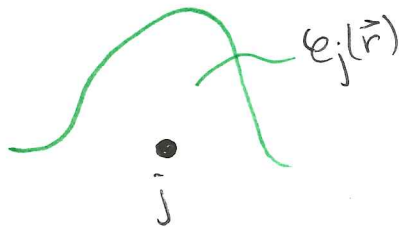
↳ stark potential, utgå från atomära vågfunktioner



lokal vågfunktion

Tight-binding
modellen

utgå från en lokal vågfn på varje atom:



$j = 0, \dots, N$ antal atomer!

Försök hitta en vågfn av formen $\psi_{\vec{k}} = \sum c_{kj} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_j)}$

superposition av lokala vågfn'er!

Lösningar till SE har blockform: $\psi_{\vec{k}} = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) U_{\vec{k}}(\vec{r})$

↑
periodisk
som gitteret

Ansätt lösning på formen:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \underbrace{\exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_j)] \varphi(\vec{r} - \vec{r}_j)}_{\text{periodisk!}}$$

Energien för ett tillstånd:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \langle \vec{k} | H | \vec{k} \rangle = \int d^3\vec{r} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) H \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) =$$

$$= \frac{1}{N} \sum \exp(i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_m)) \langle \varphi_j | H | \varphi_m \rangle$$

$$= \int d^3\vec{r} \varphi^*(\vec{r} - \vec{r}_j) H \varphi(\vec{r} - \vec{r}_m)$$

$$= \left\{ \text{ngt tal som beror på } j \text{ och } m \right\}$$

$$\approx 0 \quad \left\{ \text{om atom } j \text{ är långt bort ifrån atom } m \right\}$$

