F14 Tight-binding modellen (Hückelmodellen!) Tors LV 6

↳ utgår från atomära funktioner

Energin $$\varepsilon_{\bar k} = \frac{1}{N}\underbrace{\sum_{j,m}}_{\text{summor över atomer!}} \exp\left[i\bar k(\bar r_m - \bar r_j)\right]\langle e_j|H|e_m\rangle$$

$$\langle e_j|H|e_m\rangle = \int d^3r\, \underbrace{e^*(\bar r - \bar r_j)}_{\substack{\text{atomära vågfkner} \\ \text{centrerad i } \bar r_j}}\, \overset{\text{kinetisk+potentiell}}{H}\, e(\bar r - \bar r_m)$$

obs! tecknet är konvention

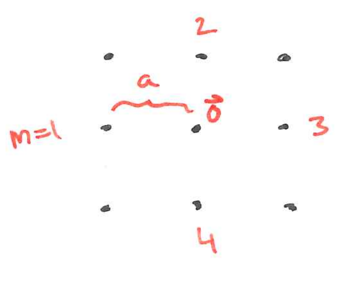
$$= \begin{cases} -\alpha & \text{om } m=j, \text{ dvs samma atom} \\ -\gamma & \text{om } m \text{ och } j \text{ är närmsta grannar} \\ 0 & \text{om } m \text{ och } j \text{ är 'längre' från varandra} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_{\bar k} = \underbrace{\frac{1}{N}\sum_j -\alpha\exp(i\bar k\cdot\bar 0)}_{-\alpha N} + \underbrace{\frac{1}{N}\sum_j\sum_{\substack{m=\bar r_m \text{ är} \\ \text{granne till } \bar r_j}} -\gamma\exp(i\bar k(\bar r_m - \bar r_j))}_{\text{ta } j\equiv\bar r_j = 0}$$

$$= -\alpha - \gamma\sum_{\substack{m \text{ grannar} \\ \text{till } \bar 0}} \exp(i\bar k\bar r_m)$$

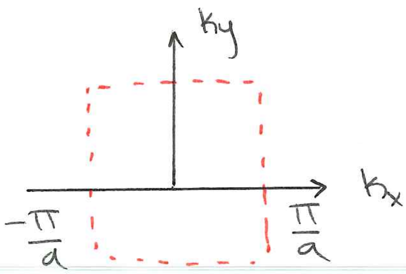
{ε_k beror på gittret, hur många grannar, ...}

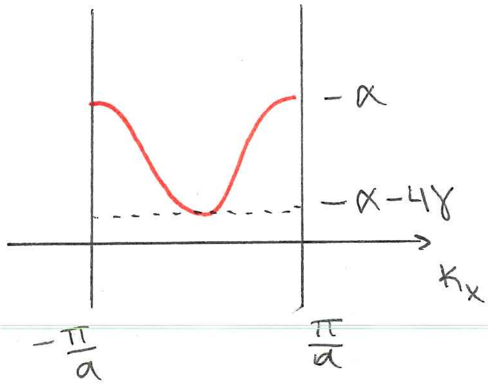
Ex. 2D kvadratiskt.



$$\left.\begin{aligned} r_1 &= -a\hat x \\ r_2 &= a\hat y \\ r_3 &= a\hat x \\ r_4 &= -a\hat y \end{aligned}\right\}\quad \varepsilon_k = -\alpha - \gamma\left(e^{-ik_xa} + e^{ik_ya} + e^{ik_xa} + e^{-ik_ya}\right) = -\alpha - 2\gamma\left(\cos k_xa + \cos k_ya\right)$$

I 1BZ, ta $k_y = 0$





Ett band

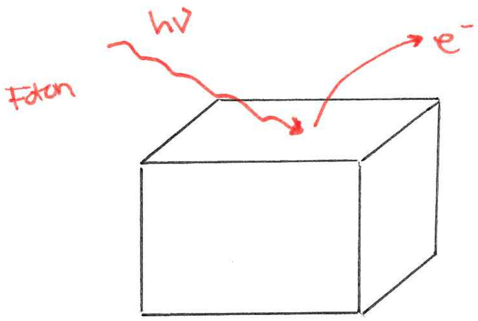
{Fler orbitaler per atom $\rightarrow$ fler band}

Två sätt att få en bandstruktur

- Fria elektroner + svag periodisk potential
- Tight-binding modellen

Mäta band / Fermiytor

Modernt: ARPES: Angle Resolved Photoemission



— mät energi och $\bar{k}$!

$\rightarrow$ Fermiyta / bandstruktur

Alt. Mäta oscillationer av elektroniska egenskaper som funktion av magnetfält

De Haas-van Alphen effekten: oscillationer av termodynamiska storheter, tex. C_V

Elektroner i magnetfält

Svagt fält $\Rightarrow$ elektroner kan beskrivas klassiskt

$\Rightarrow$ periodiska banor längs fermiytan

Starkare fält $\Rightarrow$ kvantmekanisk beskrivning nödvändig

$\Rightarrow$ lös SE för elektron i magnetfält

vektorpot.

Hamiltonian $\quad H = \frac{1}{2m}(\bar{p} + e\bar{A})^2 - e\varphi$ $\leftarrow$ skalärpot.

där $\begin{cases} \vec{B} = \nabla \times \bar{A} \\ \bar{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} \end{cases}$

$$\left\{ \text{RE.} \quad m\frac{d\bar{v}}{dt} = -e\left[\bar{E} + \vec{v} \times \vec{B}\right] \right\}$$

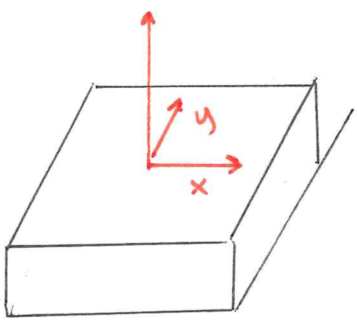
SE: $\quad H\Psi(x,y) = E\Psi(x,y)$

där vi har statiskt magnetfält $\hat{B} = B\hat{z}$, $\vec{E} = 0$

$\hookrightarrow$ vi kan välja $\vec{A} = \vec{B}\times\hat{y}$, $\varphi = 0$

Landau gauge

$\bar{B} = B\vec{z}$



$$H = \frac{1}{2m}\left(\bar{p} + exB\hat{y}\right)^2$$

$$\left\{ \bar{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\hat{x} - i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\hat{y} = P_x\hat{x} + P_y\hat{y} \right\}$$

$$= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left(P_y + exB\right)^2$$

$H\Psi = E\Psi$?

↳ H beror ej på y, endast $\frac{\partial}{\partial y}$

→ Ansätt lösn. $\Psi(x,y) = \underbrace{\exp(-iky)}_{\text{egenfkn. till } \frac{\partial}{\partial y}} \varphi(x)$

$$H\varphi(x) = \left[\frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}(-\hbar k + exB)^2\right]\varphi(x)$$

$$= \left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2m} m \underbrace{\left(\frac{eB}{m}\right)^2}_{w_c = \frac{eB}{m}} \left(-\frac{\hbar k}{eB} + x\right)^2\right]\varphi(x)$$

magnetisk längd

$$= \left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m w_c^2 (x - x_0)^2\right]\varphi(x)$$

$$P_x^2 + \frac{1}{2} m w_c^2 (x - x_0)^2$$

Harmonisk oscillator!

Lösningar: $\varphi(x) = H_n(x - x_0)$ $n = 0, 1, 2, \ldots$

Obs! De är centrerade i $x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$

$H\Psi(x,y) = E\Psi(x,y)$ där $E = \hbar w_c(n + \frac{1}{2})$

$\Psi(x,y) = \exp(-iky) H_n(x - x_0)$

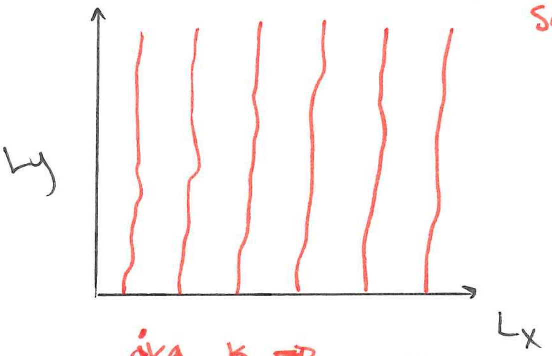
två kvanttal k och n (istället för k_x, k_y)

Lösningarna är degenererade! : Alla Ψ_{kn} med samma n har samma energi (energin oberoende av k!)

En nivå n ($n=0$ eller $n=1, \dots$) kallas Landaunivå

Hur många tillstånd i en Landaunivå?

samma n



Vi måste ha x_0:

$0 < x_0 < L_x$

(vi kan inte ha tillstånd som lever utanför)

öka $k \Rightarrow$ olika $x_0 = \frac{\hbar k}{eB}$

$$0 < x_0 = \frac{\hbar k}{eB} < L_x \Rightarrow 0 < k <$$

Tillståndstäthet i k: $2\left(\frac{L_y}{2\pi}\right)$

spinn

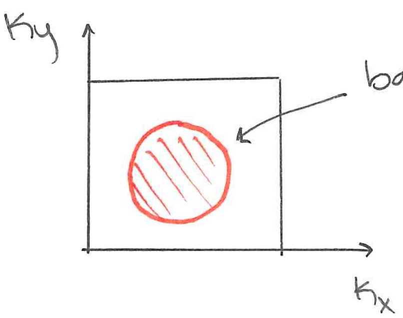
$$N_{Landau} = \frac{L_x eB}{\hbar} \cdot 2\left(\frac{L_y}{2\pi}\right) = L_x L_y \frac{B}{\Phi_0}$$

Antal tillstånd i en Landau-nivå

$\equiv A \frac{B}{\Phi_0}$

Fluxkvantat: $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$

I termer av banor på Fermiytan ortogonala mot B:



bana S i k_x-k_y-planet

A_s = arean av banan

$$\Rightarrow N = A_s \left(\frac{2\pi}{L_x}\right)^{-1}\left(\frac{2\pi}{L_y}\right)^{-1} \cdot 2 = \cancel{A_s \frac{8\pi^2}{A^{-1}}} \; A_s \frac{A}{2\pi^2}$$

antal tillstånd inne i banan

I ett magnetfält är detta kvantiserat i

$N =$ ett helt antal Landaunivåer

$= N_{Landau} \cdot \{heltal\}$

area i reella rummet

$\Rightarrow \frac{A_s A}{2\pi^2} = A \frac{B}{\Phi_0} \cdot \{heltal\}$

$$A_s = 2\pi^2 \frac{B}{\Phi_0} \{heltal\}$$

area i k-rummet

$$A_s = 2\pi^2 \frac{B}{\Phi_0} \{heltal\} \Rightarrow \frac{1}{B} = \frac{2\pi^2}{A_s \Phi_0} \{heltal\}$$

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{2\pi^2}{\Phi_0 A_s}$$

{gör att detta stämmer periodiskt i $\frac{1}{B}$, period $\sim \frac{1}{A_s}$}