

# Superficies de Fermi y metales.

Bibl. Kittel, Cap. 9

La superficie de Fermi se define por la ecuación

$$\boxed{E_n(\mathbf{k}) = E_F}$$

Puede haber más de un  $n$  que lo satisfaga.

Las prop. eléctricas se determinan en un metal por el volumen y forma de la S.F. La corriente se debe a cambios de ocupación en los estados próximos a la S.F.

La S.F. puede tener una forma complicada en el esquema de zona reducida.

Ya hemos demostrado que los  $\vec{k}$  de las funciones de Bloch se pueden escoger todos en la 1ra zona de Brillouin.

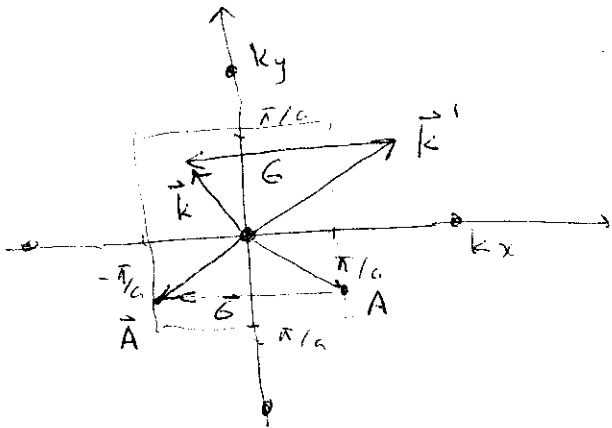
Recordemos:

Si  $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{G}$  y  $\vec{k}'$  está fuera de la 1ra zona y  $\vec{G}$  es tal que  $\vec{k}$  está dentro

$$\begin{aligned}\Psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \underbrace{(e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}'}(\vec{r}))}_{\text{periódica}} \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})\end{aligned}$$

y como analizamos en detalle en el tema anterior, tendrá la misma energía.

Para una red cuadrada de lado  $a$ , la 1ZB es cuadrada también

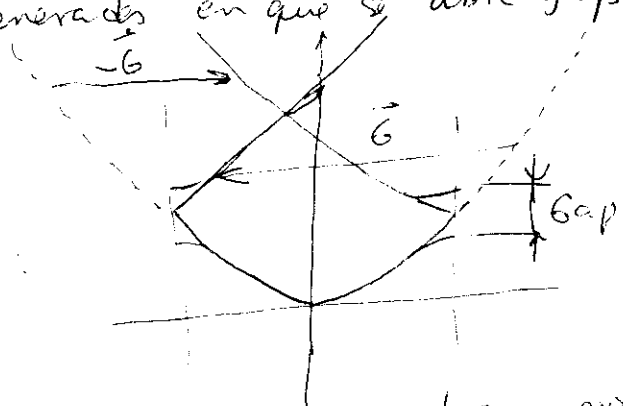


Se indican  $\bullet$  los pto de red recíproca

Pregunta:

$\vec{A}$  y  $\vec{A}'$  están en el borde de la 1ZB, conectados por  $\vec{G}$ . ¿Son el mismo estado?

R/ Son el mismo pto, pero habrán dos estados degenerados en que se abre gap.



En el esquema de zona extendida

$\Psi_{\pi/a}$  y  $\Psi_{-\pi/a}$  son diferentes y degenerados. En el esq. de zona reducida ha como

$$\Psi_{\pi/a} \rightarrow \Psi_{1,\pi/a} \text{ ó } \Psi_{1,-\pi/a}$$

$$\Psi_{-\pi/a} \rightarrow \Psi_{2,\pi/a} \text{ ó } \Psi_{2,-\pi/a}$$

Al "conectar" el potencial periódico se abre el gap.

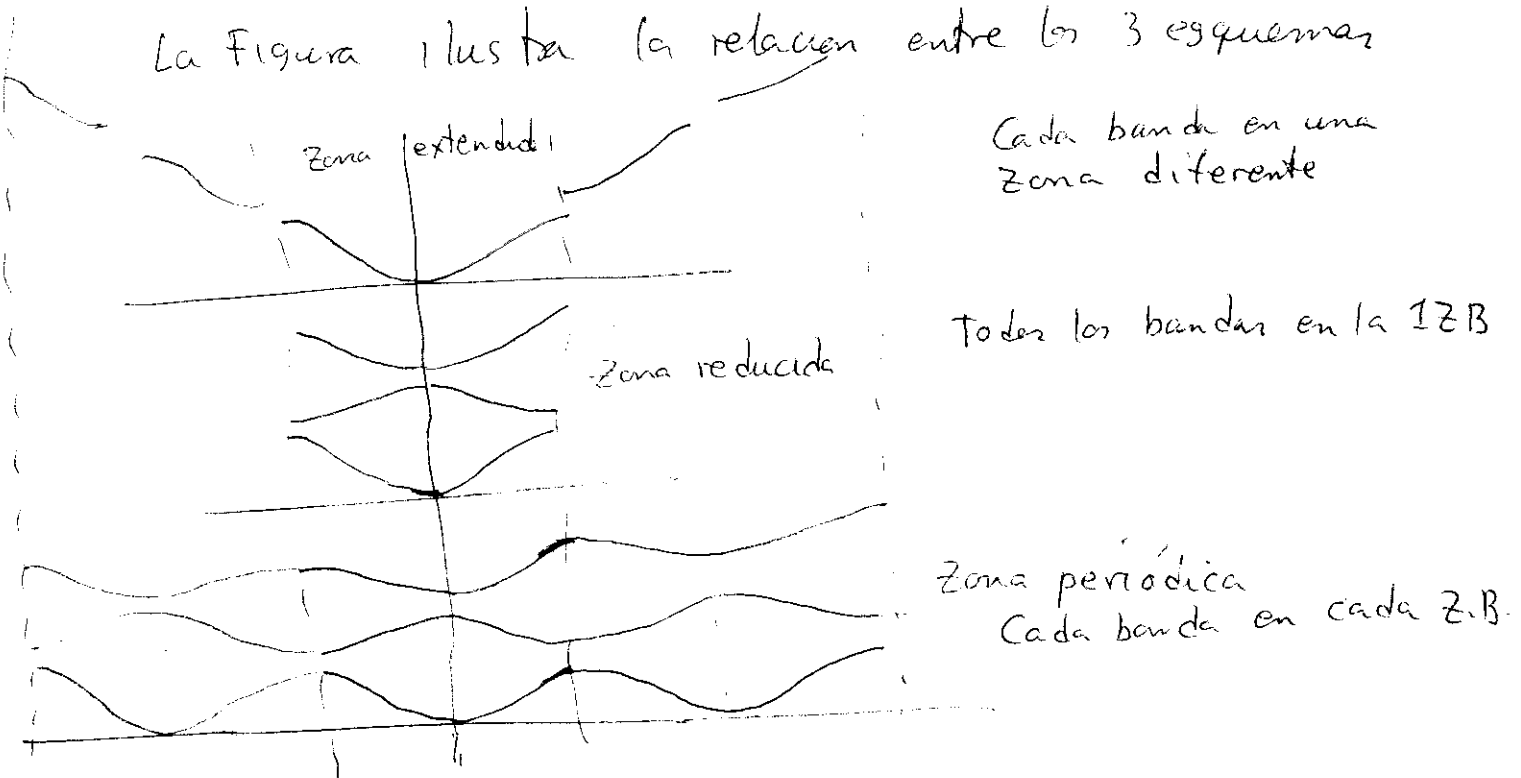
Esquema de zona periódica.

Se utiliza para visualizar las superficies de Fermi.

Se repiten todas las bandas fuera de la 1<sup>ra</sup> ZB, aunque sea duplicidad en conteo de los estados. O sea, se hacen todas las traslaciones

$$\vec{\epsilon}_k \Rightarrow \epsilon_{k+\vec{G}} \quad \forall \vec{G}$$

La Figura ilustra la relación entre los 3 esquemas



En una red cúbica simple (3D) el esquema tight-binding da

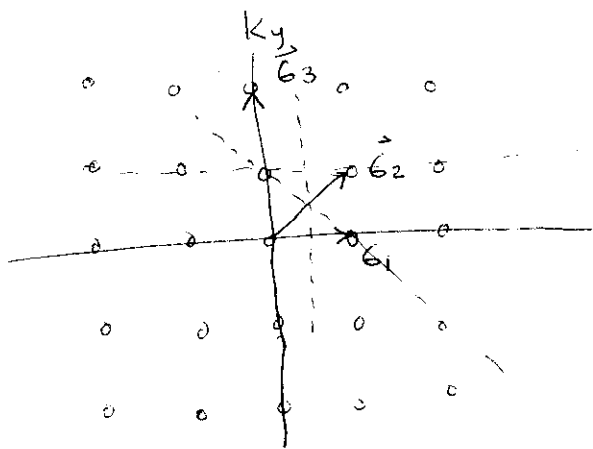
$$E(\vec{k}) = -\alpha - 2\beta (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

$$\text{Si } k_x \rightarrow k_x + 2\pi/a$$

$$\begin{aligned} E(\vec{k}') &= -\alpha - 2\beta (\cos(k_x + \frac{2\pi}{a})a + \cos k_y a + \cos k_z a) \\ &= E(\vec{k}) \end{aligned}$$

# Construcción de la superficie de Fermi.

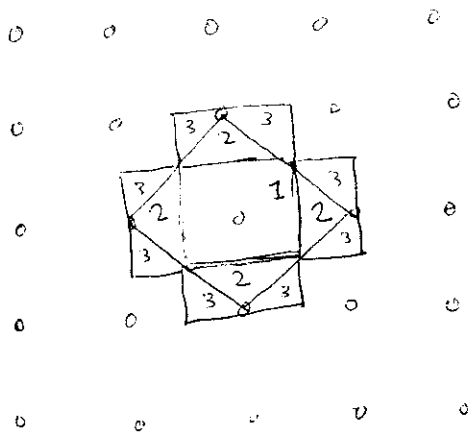
Analizemos una red cuadrada (2D)



Las bisectantes a  $\vec{G}_1, \vec{G}_2, \vec{G}_3$  y los demás son bordes de zona.

La 1ª ZB se construye encerrada por los planos bisectantes a  $\vec{G}_1$  y sus 3 equivalentes por simetría.

La 2da ZB está encerrada por los planos bisectantes a  $\vec{G}_2$  y sus equivalentes.



Un principio fundamental para dibujar las Z.B. es que todas tienen la misma área.

Para gas de  $N$  electrones libres, el radio de la S.F. es

$$k_F = \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad \text{en 3D.}$$

$$N \equiv \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi k_F^3}{(2\pi/L)^3}, \quad L^3 = V$$

spin  $\rightarrow$

En 2D diríamos  $N = 2 \cdot \frac{\pi k_F^2}{(2\pi/L)^2}$

$$2\pi \frac{N}{L^2} = k_F^2, \quad L^2 = A, \quad N/A = n$$

$$k_F = \sqrt{2\pi n}$$

Nota: Cada  $\vec{k}$  tiene un volumen  $\frac{(2\pi)^3}{V}$  o  $\frac{(2\pi)^2}{A}$  en el espacio  $\vec{k}$  y alberga 2 electrones (spin up y down).  $N = 2 \times \text{Volumen total} / \text{Vol. } 1\vec{k}$

Metales monovalentes. en aproximacion cuasi libre

Tienen todas las bandas llenas excepto 1.

Cada celda aporta 1 electron, llena media banda, le corresponde la mitad del area de la 1ra Z.B.

$$A_{1zB} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 = b^2$$

Detallado:

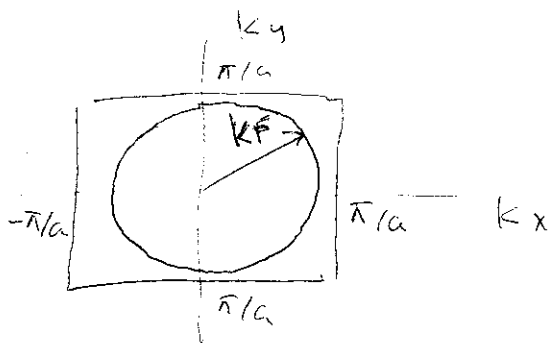
$$k_F^2 = 2\pi \frac{N}{V}$$

$$\frac{N}{V} = \frac{\text{Num. celdas}}{a^2 \times \text{Num. celdas}} = \frac{1}{a^2}$$

Area de la Estera de Fermi

$$k_F^2 = \frac{2\pi}{a^2} \implies A_{E.F.} = \pi k_F^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 = \frac{1}{2} A_{1zB}.$$

$$k_F = \frac{1}{\sqrt{2}\pi} \left(\frac{2\pi}{a}\right) < \frac{b}{2} = \frac{\pi}{a}$$



La estera de Fermi queda contenida en la 1. z. B.

el efecto del potencial de la red deforma la superficie,

Se sabe, por calculos ab initio y por experimentos, que la S.F.

del Na es casi esférica, en el Cs es deformado

aprox 10%.

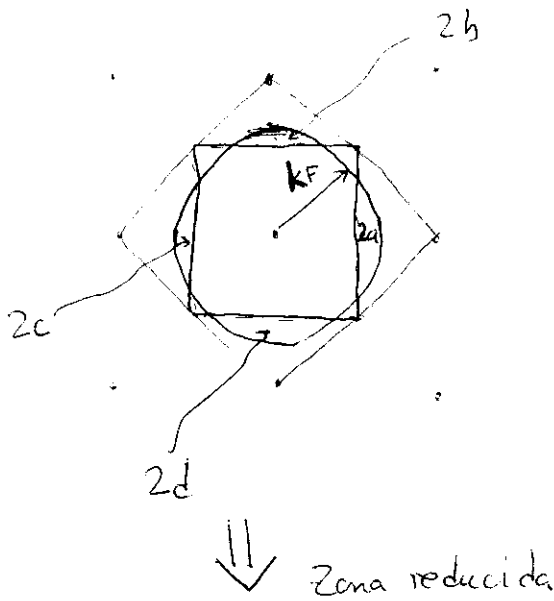
# Metales divalentes

Aportan  $2e^-$  por celda.  $\frac{N}{V} = \frac{2}{a^3}$

$$\textcircled{*} k_F^2 = 2\pi \frac{N}{V} = 4 \frac{\pi}{a^3} = \frac{1}{\pi} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2$$

$$k_F = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2\pi}{a} \right) = \sqrt{\frac{4}{\pi}} \frac{\pi}{a} > \frac{\pi}{a} = \frac{b}{2}$$

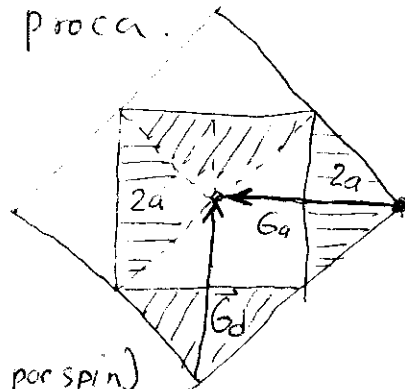
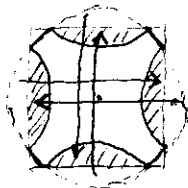
$$A_{E.F.} = \pi k_F^2 = \frac{4\pi^2}{a^2} = b^2 \quad \text{la misma area de la 1ra Z.B.}$$



Las zonas  $2a, 2b, 2c, 2d$  pertenecen a la 2da Z.B.

La esfera de Fermi es una esfera en el esquema de zona extendida.

Para representarla en Zona Reducida hay que trasladar las partes de la 2ZB a la 1ZB mediante vectores de red Recíproca.



$$\vec{G}_a = -\frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{G}_d = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

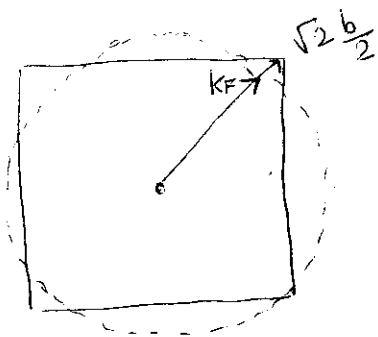
Todo el cuadrado de la 1ra Z.B. tiene al menos un estado ocupado (doblemente por spin)

La zona sombreada tiene otro estado ocupado (doblemente), o sea  $E_1(\vec{k})$  y  $E_2(\vec{k})$

## Metales trivalentes

$$\frac{A_{E.F.}}{A_{1ZB}} = \frac{3}{2} = \frac{\pi k_F^2}{b^2}$$

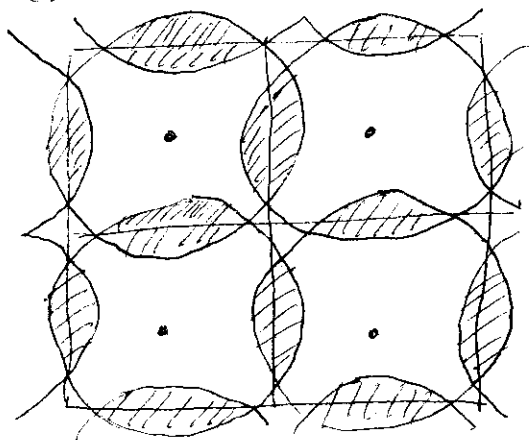
$$k_F = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} b = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{b}{2} < \sqrt{2} \frac{b}{2}$$



Cualitativamente es igual al caso de metales divalentes, donde  $k_F^{(2)} = \sqrt{\frac{4}{\pi}} \frac{b}{2}$ . La S.F. sigue contenida en la 1ra y 2da Z.B.

Ver en Kittel, Cap 9, la discusión de un caso supuesto en que la superficie de Fermi tiene parte en la 3ra Z.B.

Dibujos de Fermi. Dibujar una estera centrada en cada punto de la red recíproca. Donde coinciden 2 o más esteras, hay la correspondiente cantidad de bandas ocupadas.



Las áreas hatched son de coincidencia de 2 esteras. Los  $\vec{k}$  correspondientes tienen 2 ~~bandas~~ bandas ocupadas con 4 electrones.

Esto es un esquema de Zona Periódica

## Efectos del potencial periódico

- Aparecen gaps en los bordes de zona
- Casi siempre la superficie de Fermi intersecta los bordes de zona perpendicularmente
- Las esquinas o puntas se redondean
- Se conserva el volumen total encerrado en la S.F., pues solamente depende de la densidad de electrones.



Velocidad de las electrones en una banda tridimensional

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

La ecuación  $\frac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = -e\vec{F}$  se generaliza a

$$\frac{d\hbar\vec{k}}{dt} = \vec{F} \rightarrow \text{Puede incluir fuerza magnética}$$

$$\vec{F}_m = -e\vec{v} \times \vec{B} = -\frac{e}{\hbar} (\vec{\nabla}_{\vec{k}} E) \times \vec{B}$$

La  $\vec{F}_m$  es perpendicular a  $\vec{B}$  y a  $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E$   
Si no hay otra fuerza externa (no periódica)  
luego  $\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} E) \times \vec{B}$

es  $\perp \vec{B}$  y  $\perp \nabla_{\vec{k}} E$ , entonces paralelo a  
la superficies  $E(\vec{k}) = \text{cte}$ .

~~Esto permite describir el movimiento de los electrones cuando~~

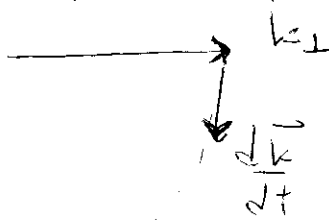
Los electrones con  $\vec{k}$  en la superficie de Fermi, cuando un campo magnético cambian su  $\vec{k}$  pero se mantienen en la sup. de Fermi. Decimos

"el electrón se mueve en la superficie de Fermi"



Sentido de giro de orbitas de hueco en espacio  $\vec{r}$

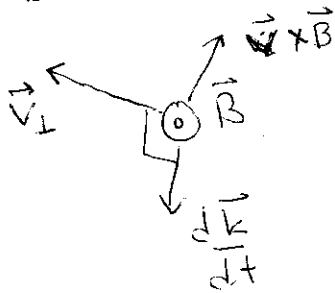
En plano  $\perp \vec{B}$



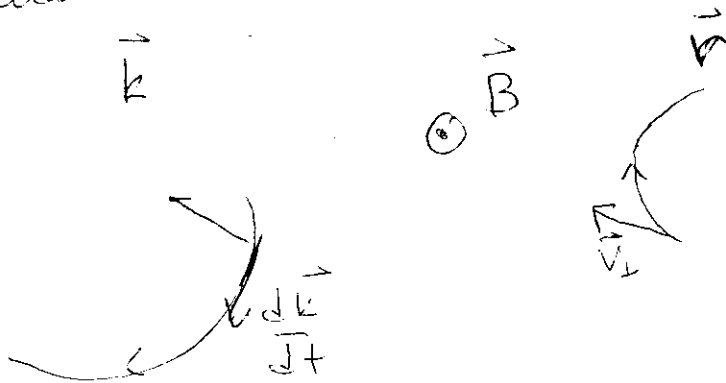
Debe cumplirse

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \vec{v} \times \vec{B} = -\frac{e}{\hbar} \vec{v}_{\perp} \times \vec{B}$$

Sea  $\vec{B} = \odot$  Apuntando hacia arriba



Cualitativamente la trayectoria son



Este sentido de giro es el de partículas de carga  $+$

Relacion entre orbitas en  $\vec{k}$  y orbitas en  $\vec{r}$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \vec{v} \times \vec{B}, \quad \vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon$$

Por la ecuacion  $\frac{d\vec{k}}{dt}$  es  $\perp \vec{B}$

$$\vec{v} = \vec{v}_{\perp} + \vec{v}_{\parallel} = \frac{d\vec{r}_{\perp}}{dt} + \frac{d\vec{r}_{\parallel}}{dt}$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e}{\hbar} \vec{B} \times \vec{v}_{\perp} = \frac{e}{\hbar} \vec{B} \times \frac{d\vec{r}_{\perp}}{dt} = \frac{e}{\hbar} B \frac{d\vec{r}_{\perp}}{dt} \hat{n}$$

Un diferencial  $\Delta k = \frac{dk}{dt} \Delta t$ ,

$$\Delta k = \frac{e}{\hbar} B \Delta r_{\perp} \quad \text{Menciona la relacion de escalas de la orbita } r_{\perp} \text{ vs } k$$

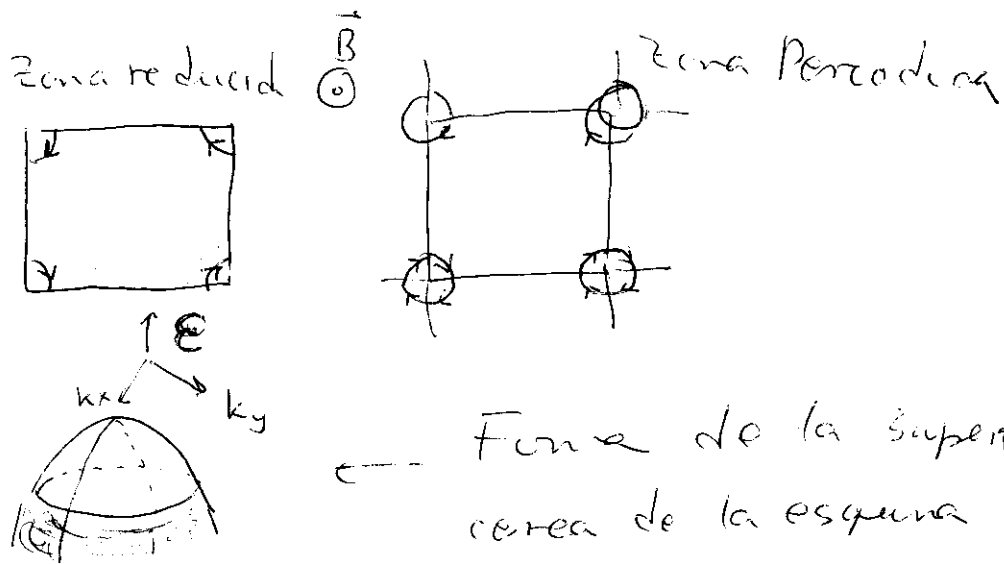
Relacion de areas de las orbitas

$$\frac{\Delta A_k}{\Delta A_r} = \left( \frac{eB}{\hbar} \right)^2$$

Solo se refiere a la trayectoria de  $r_{\perp}$ .  $r_{\parallel}$  no esta en la relacion.

Es la proyeccion de la orbita en el plano perpendicular a  $\vec{B}$ .

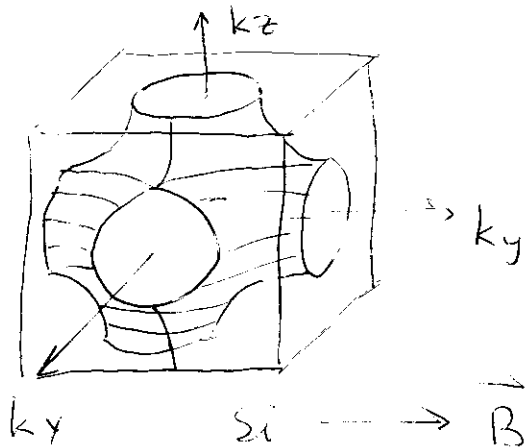
Banda casi llena, con estados vacantes en la esquina de la 1ZB



Ejemplo en 3D. Red cúbica simple

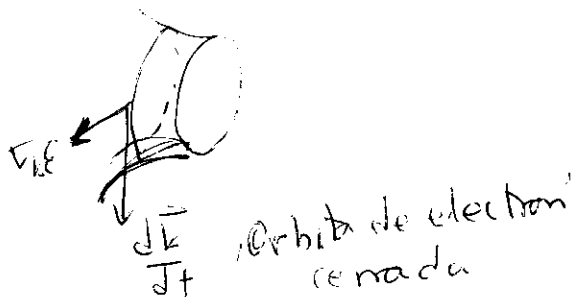
Tight-binding  $E(k) = -\alpha - 2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$

Superficie  $E(k) = -\alpha$



Busque orbitas abiertas, de electron, o de hueco.

¿Hacia donde apunta  $\nabla_k E$ ?  
R1 Hacia afuera de la superficie



## Método de experimentales de estudiar la superficie de Fermi

Magneto resistencias

Efecto película anómala

Resonancia ciclotrónica

Efecto de Haas - van Alphen

Efecto Shubnikov - de Haas

## Efecto de Haas - van Alphen (dHvA)

dHvA  $\equiv$  Oscilaciones del momento magnético en función de la intensidad de un campo magnético estático

Ver figura en pag. sigte.

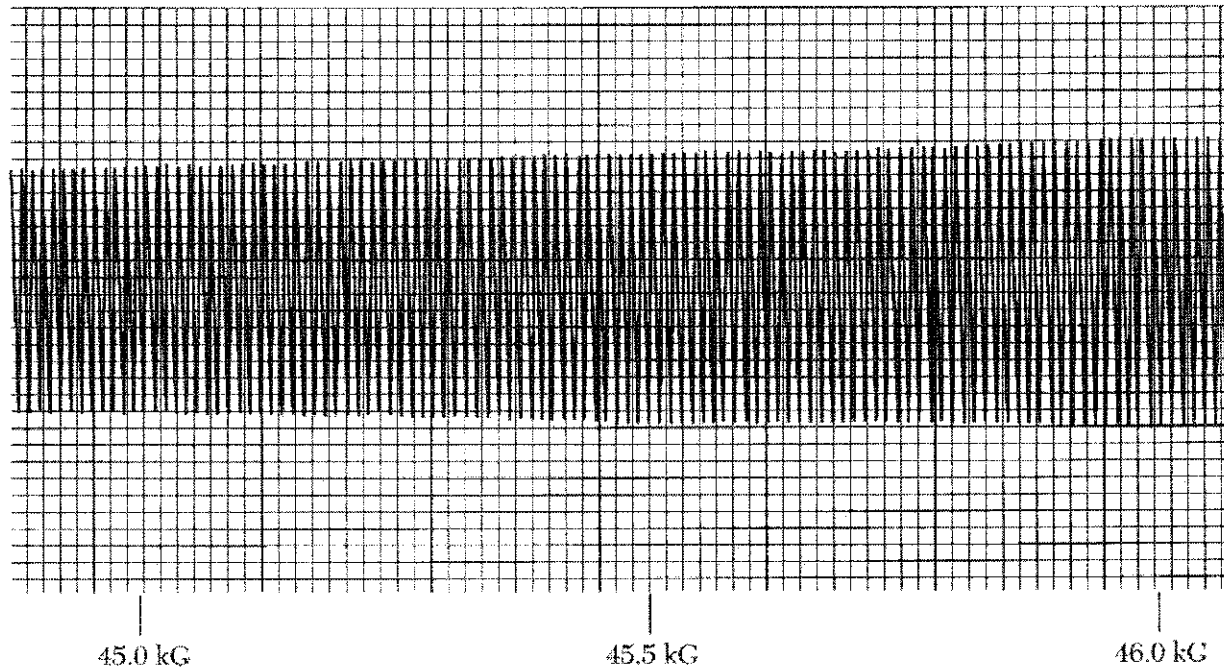
Se demuestra (más <sup>no de forma sencilla</sup>, ver Grosso y Parravicini, Cap XV) que las oscilaciones tienen periodo en  $\frac{1}{B}$

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{2\pi e}{hc} \frac{1}{A_{\text{extremal}}}$$

(en unidades CGS)

## Efecto de Haas-van Alphen

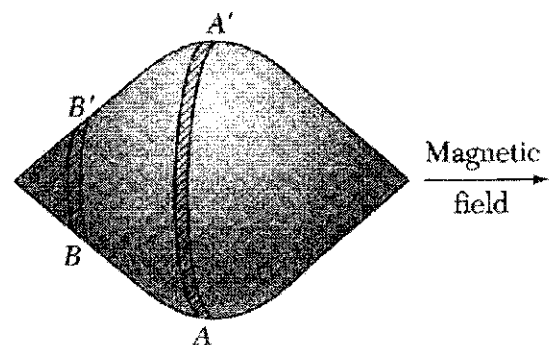
Oscilación del momento magnético de un metal como función de la intensidad del campo magnético estático.



**Figure 31** De Haas-van Alphen effect in gold with  $\mathbf{B} \parallel [110]$ . The oscillation is from the dog's bone orbit of Fig. 30. The signal is related to the second derivative of the magnetic moment with respect to field. The results were obtained by a field modulation technique in a high-homogeneity superconducting solenoid at about 1.2 K. (Courtesy of I. M. Templeton.)

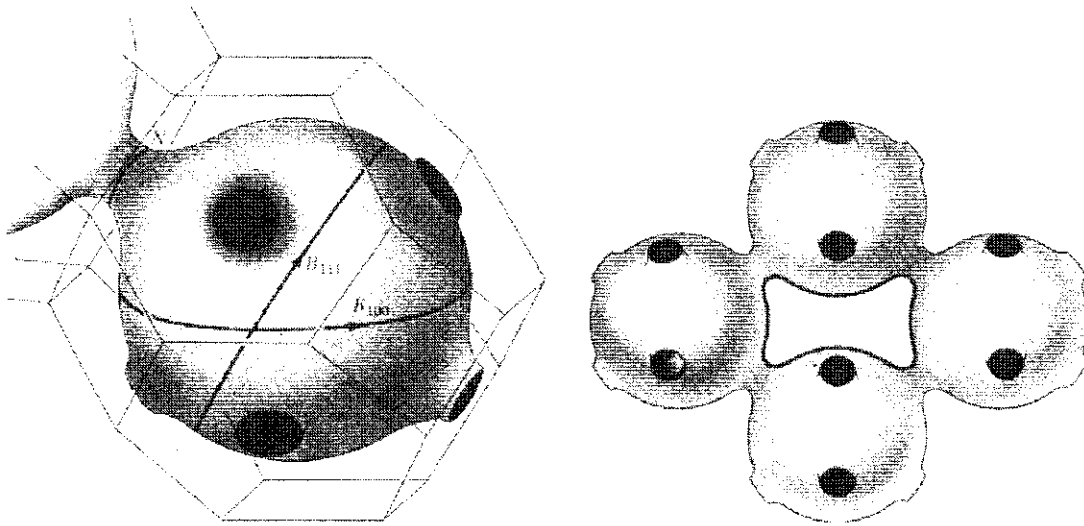
## Órbitas extremales

**Figure 28** The orbits in the section  $AA'$  are extremal orbits: the cyclotron period is roughly constant over a reasonable section of the Fermi surface. Other sections such as  $BB'$  have orbits that vary in period along the section.





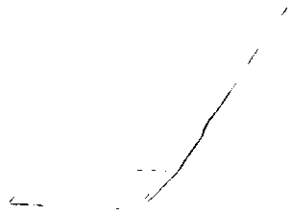




Ref. a Pippard , *Phil. Trans. Roy. Soc. Lon. A* 250,  
p. 325 (1957)

# Superficie de Fermi del cobre.

Mastier Fig 29,  
Cap 9.



Free electrons:  $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ ,  $n = \frac{4}{a^3}$  [4 electrones en la celda convencional]

$$= \left(\frac{12\pi^2}{a^3}\right)^{1/3} \approx \frac{4.90}{a}$$
$$2k_F = \frac{9.80}{a}$$

El ancho de la 12B (distancia entre las caras hexagonales) es  $10.88/a > 2k_F$ . No tocaría el borde de zona. Por efecto del potencial periódico se hacen gap, bajando la energía de banda cerca del borde de 12B. El efecto es que se establecen conexiones o cuellos en las caras hexagonales.

Las orbitales extremales se manifiestan con B perpendicular a las orbitales.

Con  $\vec{B} \parallel [111]$  se revela el cuello "N" y la orbital equatorial.

Con  $B \parallel [110]$  se revela la orbital de hueso de perro. Ver dHvA.

# Cohesión de los metales alcalinos - Método de Wigner-Seitz

$$\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + U(r) \right] e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Algebra

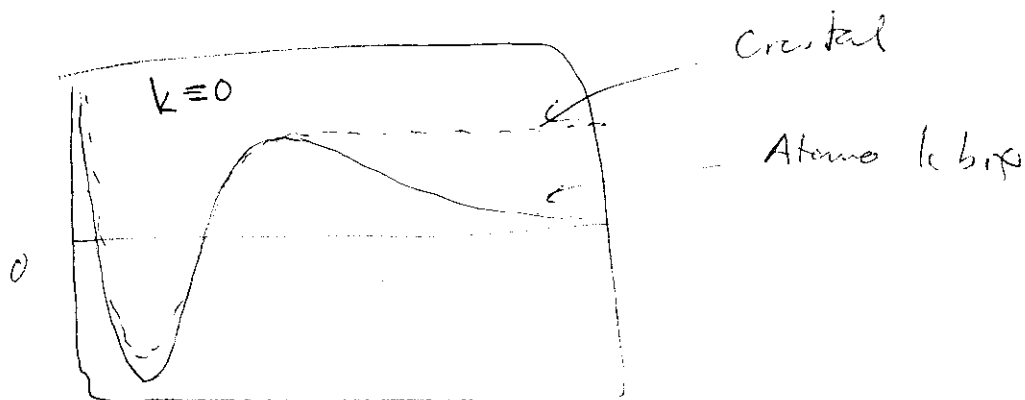
$$\left[ \frac{1}{2m} (p + \hbar\vec{k})^2 + U(r) \right] U_{\vec{k}}(r) = \epsilon_{\vec{k}} U_{\vec{k}}(r)$$

Sea  $U_0(\vec{r})$  la solución para  $\vec{k} = 0$

Aproximación  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_0(\vec{r})$

Kittel dice que con esta aproximación  $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Función de onda del Na en la banda 3s

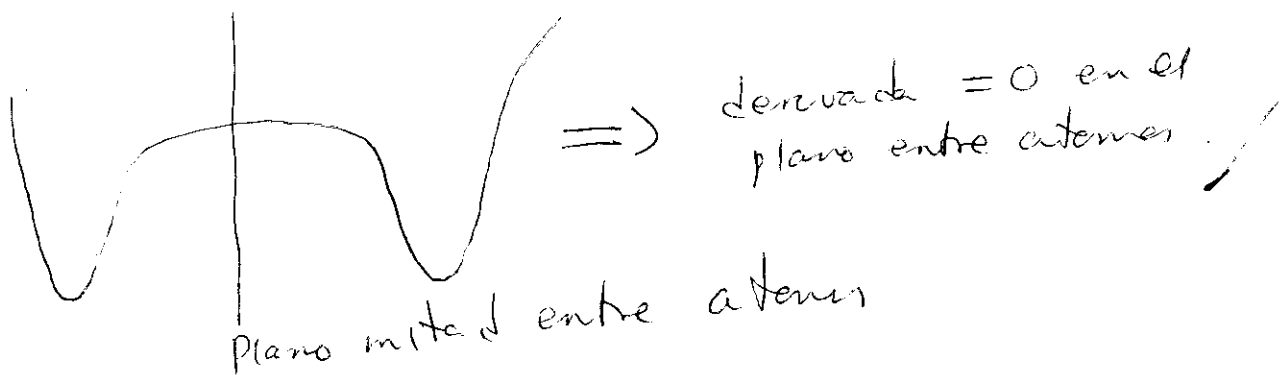


Wigner y Seitz <sup>en 1933</sup> resolvieron la  $\psi(r)$  para un solo átomo de Na y la pusieron en correspondencia con la  $\psi$  del cristal.

Átomo aislado:  $\psi(r) \rightarrow 0$  cuando  $r \rightarrow \infty$ .

(cristal,  $k=0$ ).  $\psi(\vec{r}) = U_0(\vec{r})$  tiene la simetría de la red.

Además, es simétrica respecto al origen.



Aproximación estérica

$$\left(\frac{d\psi}{dr}\right)_{r_0} = 0.$$

$r_0$  es el radio de la esfera de volumen igual al  $V$  atómico

$$\frac{4}{3}\pi r_0^3 = \frac{a_0^3}{4} \quad (\text{red fcc.})$$

$$= \frac{a_0^3}{2} \quad (\text{bcc})$$

el sodio es bcc o fcc.

Para  $k \neq 0$ , aprox.  $\psi_k = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U_0(\vec{r})$ ,  $E_k = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

~~La menor curvatura~~

Resultados numéricos de Wigner y Seitz

$$E_F = 3.1 \text{ eV}$$

$$E_0 = -8.2 \text{ eV} \quad \langle \epsilon_k \rangle =$$

$$E_{3s} = -5.12 \text{ eV} \quad (\text{átomo libre}) \quad \psi(r \rightarrow \infty) = 0$$

$$E_0 = -8.2 \text{ eV} \quad \left( \frac{d\psi}{dr} \right)_{r_0} = 0$$

La disminución de energía va por la reducción de curvatura, disminuyendo la energía cinética

$$\text{recuérdese que } E_k = \left\langle \psi \left| \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right| \psi \right\rangle$$

Del gas de electrones libres, la energía cinética promedio de una banda ~~media~~ por  $e^-$  libres es

$$\langle \epsilon_k \rangle = \left\langle \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\rangle \approx 0.6 E_F = 0.6 \times 3.1 \text{ eV} = 1.9 \text{ eV}$$

$$\text{Luego } \langle \epsilon_k \rangle = E_0 + \left\langle \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\rangle = -8.2 + 1.9 = -6.3 \text{ eV}$$

$$\langle \epsilon_k \rangle - E_{3s} = -6.3 - (-5.12) = -1.2 \text{ eV}$$

¡ El valor experimental de la energía de cohesión es 1.13 eV.  
¡ Fantástico en 1933! ¡

Leer en Kittel pag 239-242

- o Metodo de pseudopotenciales
- o Metodo de Wigner-Seitz 239-239