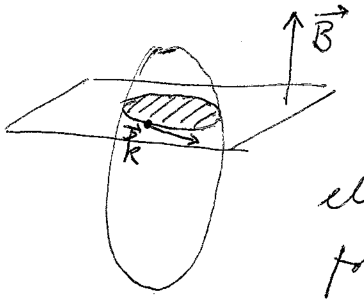
5. Určovanie Fermiho plôch. ~~[illegible]~~

A) de Haas – van Alphen:

$$\boxed{\begin{aligned} \hbar\dot{\vec{k}} &= q\,\vec{v}_k \times \vec{B} \\ \vec{v}_k &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \end{aligned}}$$



elektrón sa pohybuje pozdĺž priesečnice roviny kolmej na $\vec{B}$ a ekvienergetickej hladiny

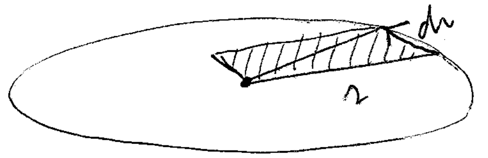
kanonická hybnosť:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} + q\vec{A}$$

Bohr–Sommerfeld: $$\boxed{\oint \vec{p}\cdot d\vec{r} = 2\pi\hbar(n+\gamma)} \qquad \gamma = \frac{1}{2}$$

$$\hbar\dot{\vec{k}} = q\,\dot{\vec{r}}\times\vec{B} \longrightarrow \hbar\vec{k} = q\,\vec{r}\times\vec{B} + \hbar\vec{k}_0$$

$$\oint \hbar\vec{k}\cdot d\vec{r} = q\oint \vec{r}\times\vec{B}\cdot d\vec{r} + \hbar\vec{k}_0\cdot\underbrace{\oint d\vec{r}}_{=0} = -q\vec{B}\cdot\oint\vec{r}\times d\vec{r} = -2\Phi q$$



$$\oint \vec{r}\times d\vec{r} = 2S$$ (area in real space)

Preto $$\oint \vec{p}\cdot d\vec{r} = -2\Phi q + q\oint\vec{A}\cdot d\vec{r} = -q\Phi \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar(n+\gamma)$$

$q = -e$

$$\boxed{\Phi = \frac{h}{e}(n+\gamma)} \longrightarrow S = \frac{(n+\gamma)\Phi_0}{B} \qquad \Phi_0 = \frac{h}{e}$$

odtiaľto $$dk = \frac{qB}{\hbar}dr \longrightarrow A = \left(\frac{eB}{\hbar}\right)^2\cdot\frac{2\pi\hbar}{eB}(n+\gamma)$$

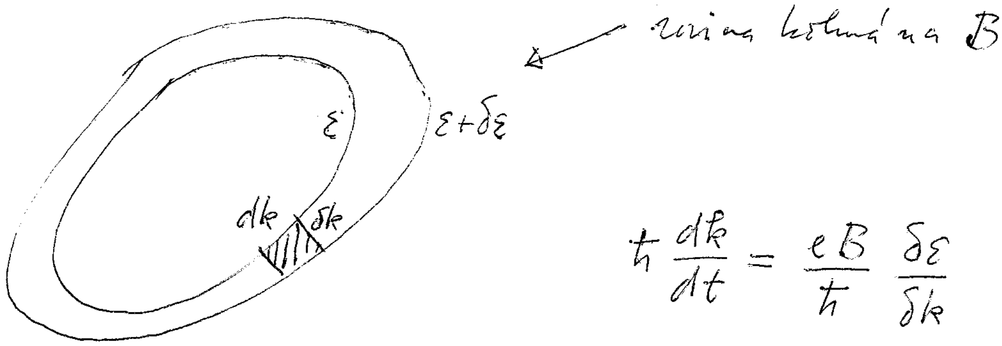
$$\boxed{A_n = \frac{eB\cdot 2\pi}{\hbar}(n+\gamma)}$$ ... plocha v k-priestore

Označme $k_z \parallel B$, $k_x, k_y \perp B$

Plocha v rovine k_x, k_y pripadajúca na 1 hladinu

$$\Delta A = \frac{2\pi e B}{\hbar} \qquad \text{Preto} \qquad \boxed{\int \frac{dk_x\,dk_y}{(2\pi)^2} \longrightarrow \frac{eB}{2\pi\hbar}\sum_n}$$

• frekvencia ~~kruhového~~ periodického pohybu



$$\hbar\frac{dk}{dt} = \frac{eB}{\hbar}\frac{\delta\varepsilon}{\delta k}$$

$$\underbrace{dk\,\delta k}_{dA} = \frac{eB}{\hbar^2}\,\delta\varepsilon\, dt$$

$$\underbrace{\oint dA}_{\delta A} = \frac{eB}{\hbar^2}\,\delta\varepsilon \underbrace{\oint dt}_{T\ \text{(perióda)}} \longrightarrow \boxed{T = \frac{\hbar^2}{eB}\frac{\delta A}{\delta\varepsilon} = \frac{\hbar^2}{eB}\frac{dA}{d\varepsilon}}$$

$$\boxed{\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi e B}{\hbar^2 \frac{dA}{d\varepsilon}}}$$

cyklotrónová frekvencia (závisí od $\underline{k_z}$ a $\underline{n}$)

• kvantovanie energie

$$\omega_c = \frac{2\pi e B}{\hbar^2}\frac{\Delta\varepsilon}{\Delta A} \longrightarrow \Delta\varepsilon = \hbar\omega_c\frac{\hbar\Delta A}{2\pi e B} = \hbar\omega_c$$

$$\Delta\varepsilon = \hbar\omega_c \longrightarrow$$

$$\boxed{\varepsilon_n(k_z) = \hbar\omega_c\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + E(k_z)}$$

(nemožno vždy zvoliť vhodné $E(k_z)$)

$$\boxed{\omega_c = \omega_c(k_z)}$$

pre $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \longrightarrow \boxed{\omega_c = \frac{eB}{m^*}}$

uvažujme pre jednoduchosť systém elektrónov bez zahrnutia spinu, $T=0$:

celk. energia v magnetickom poli (na jednotkový objem) $$E = \int \frac{dk_z}{2\pi}\int \frac{dk_x\, dk_y}{(2\pi)^2}\, f(\vec{k})\, E_{\vec{k}}$$

$$\downarrow$$

$$E = \int \frac{dk_z}{2\pi}\, \underbrace{\frac{eB}{2\pi\hbar}\sum_n f_{nk_z} \cdot \varepsilon_n(k_z)}_{E(k_z)}$$

$$E(k_z) = \frac{B}{\phi_0}\sum_n f_n(k_z)\left[\hbar\omega_c(k_z)\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \varepsilon(k_z)\right]$$

nech pre dané k_z má v nulovom poli $B=0$ prierez Fermiho plochy plochu A $\rightarrow$ koncentrácia elektrónov (plošná) $\boxed{n = \frac{A}{4\pi^2}}$

Predpokladajme, že pre $B \neq 0$ ostane n nezmenené

$\rightarrow$ obsadené hladiny $0, 1, \ldots, N$ .. úplne

$N+1$ .. čiastočne $\qquad N+1 < \frac{n\phi_0}{B} < N+2$

definujme plniaci faktor $\boxed{\nu = \frac{n\phi_0}{B}}$

$$E(k_z) = \frac{B}{\phi_0}\left\{\sum_{n=0}^{N} \hbar\omega_c\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \left(n - \frac{(N+1)B}{\phi_0}\right)\hbar\omega_c\left(N+\tfrac{3}{2}\right) + \cancel{z\text{-ová časť}}\right.$$

~~z-ová časť kin. energie~~ nezávisí od B ďalej neuvažujeme

$$E(k_z) = \frac{B\hbar\omega_c}{2\phi_0}\left\{\underbrace{(N+1)^2 + \overbrace{2(N+1)X + X}}\right\}$$

$$= \nu^2 + X(1-X) \qquad \boxed{X = \nu - (N+1)}$$

$$\boxed{E(k_z) = \frac{B\hbar\omega_c}{2\phi_0}\left(\nu^2 + X(1-X)\right)} \longrightarrow \boxed{X \in \langle 0, 1\rangle}$$

To možno písať aj

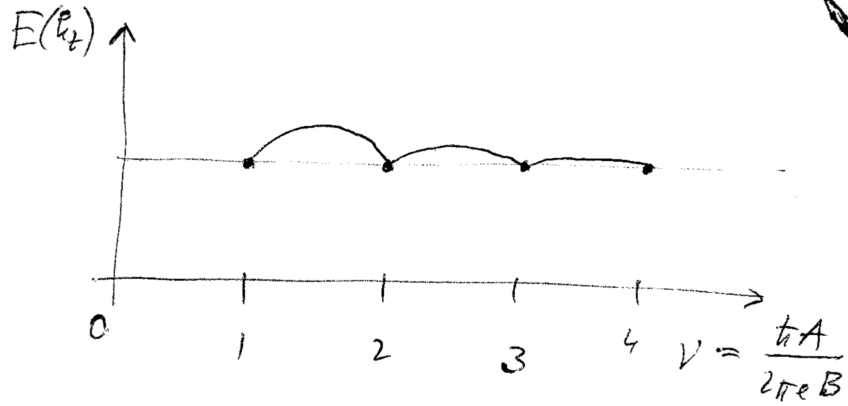
konštanta nezávislá od B

$$\boxed{E(k_z) = \frac{1}{8\pi^2}\frac{d\varepsilon}{dA}A^2\left(1+\frac{x(1-x)}{\nu^2}\right)}$$

$$\nu = \frac{n\Phi_0}{B} = \frac{\hbar A}{2\pi e B}$$

$$\boxed{x = \nu - [\nu]} \in \langle 0,1)$$

celá časť



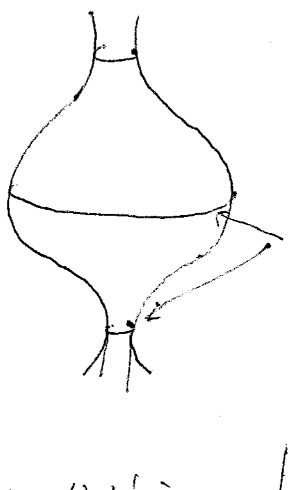
pre $\nu \gg 1$
periodická funkcia $\frac{1}{B}$
s periódou $\frac{2\pi e}{\hbar A}$

celková energia

$$\delta E(B) = \int \frac{dk_z}{2\pi}\,\frac{1}{8\pi^2}\,\frac{d\varepsilon}{dA}A^2\,\underbrace{\frac{x(1-x)}{\nu^2}}$$

pre rôzne k_z → rôzne $A(k_z)$
→ rôzne frekvencie oscilácií
→ deštruktívna interferencia !

Prežijú iba extremálne orbity: $\boxed{\frac{dA(k_z)}{dk_z} = 0}$



extremálne orbity

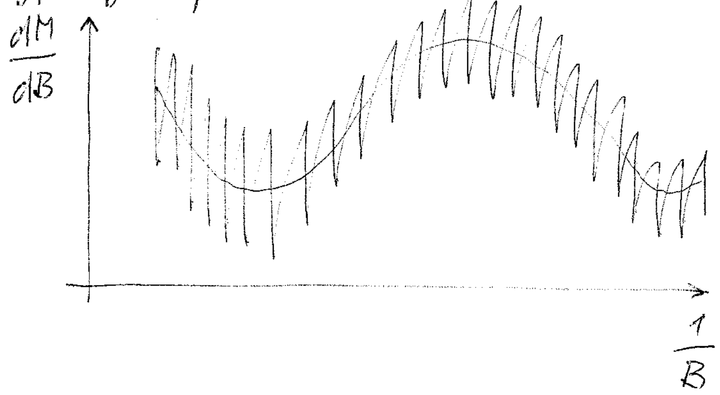
podmienky pozorovateľnosti:

nízke T čistá vzorka veľké B	$\omega_c \tau \gg 1$	τ = doba života
	$\hbar\omega_c \gg T$	T = teplota
	$\hbar\omega_c \ll \frac{\Delta^2}{\varepsilon_F}$	(absencia prierazu, viď ďalej)

magnetizácia: $\boxed{M = -\frac{\partial E}{\partial B}}$ → oscilujúce zložky s frekvenciami

$$\boxed{\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_{extrem}}}$$

Typický experiment:



→ 2 extremálne orbity

často aj viac

→ Fourierova analýza

funkcie $\chi = \chi\left(\frac{1}{B}\right)$

<u>Príklad:</u>

$Cu = [Ar]\, 3d^{10} 4s^1$

fcc mriežka

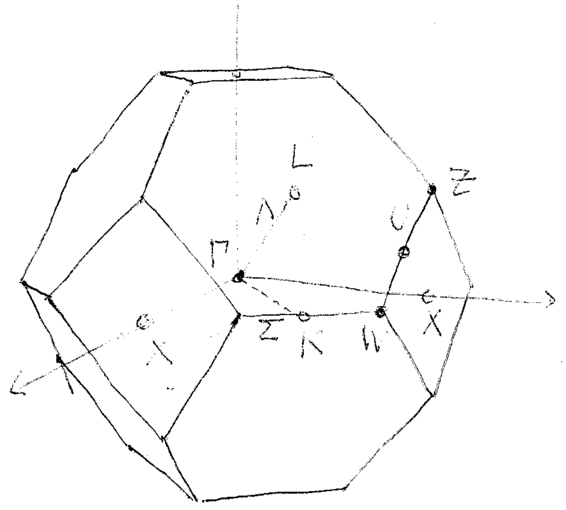
v jednotkách $\frac{2\pi}{a}$

$\Gamma = (0,0,0)$

$X = (1,0,0) \qquad W = (1,\frac{1}{2},0)$

$L = (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \qquad K = (\frac{3}{4},\frac{3}{4},0)$

$U = (1,\frac{1}{4},\frac{1}{4})$



$\vec{k}_F$ pre fcc mriežku:
(voľné elektróny)

$$n = \frac{4}{a^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \longrightarrow \boxed{k_F = \sqrt[3]{\frac{3}{2\pi}} \cdot \frac{2\pi}{a}}$$

≈ 0.78

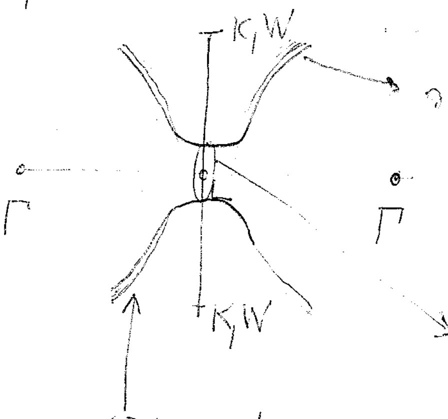
priesečníky Fermiho plochy v smeroch

ΓL:	(q,q,q)	$q \approx 0{,}45 \cdot \frac{2\pi}{a}$	$0{,}09 \cdot \frac{2\pi}{a}$
ΓX:	$(q,0,0)$	$q \approx 0{,}78 \cdot \frac{2\pi}{a}$	$0{,}22 \cdot \frac{2\pi}{a}$
ΓK:	$(q,q,0)$	$q \approx 0{,}55 \cdot \frac{2\pi}{a}$	$0{,}28 \cdot \frac{2\pi}{a}$

vzdialenosť od hranice zóny

Fermiho plocha je najbližšie
k hranici zóny v smere ΓL

pohľad pozdĺž šesťuholníkovej hranice zóny:



→ skutočná Fermiho plocha ≈ guľa + 8 "krkov" (necks)

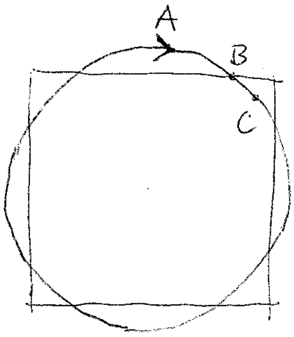
v smeroch $\langle 111 \rangle$

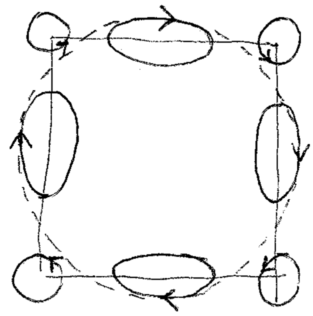
→ extremálna orbita pre $B \parallel \langle 111 \rangle$

voľné elektróny

pre ten istý smer B druhá extremálna plocha je $\approx \pi k_F^2$

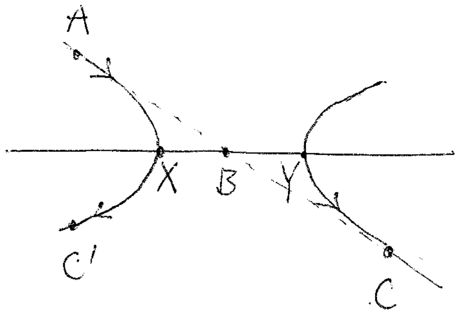
B) Magnetický prieraz





vysoké polia ⟵ nízke polia

zvyšujeme B
kedy nastane
magnetický prieraz?



Pravdepodobnosť tunelovania z X do Y:

vzdialenosť medzi X a Y $\sim \boxed{\frac{\Delta}{\hbar v_F}}$ → ~~roz~~štiepenie pásov v bode B

neurčitosť hybnosti a súradnice v mag. poli: $\delta k, \delta r$

Heisenberg: $\delta k \cdot \delta r \sim 1$

pohybová rovnica (str. 1): $\delta r \sim \frac{\hbar}{eB}\delta k$

$\left.\right\} \rightarrow \boxed{\delta k \sim \sqrt{\frac{eB}{\hbar}}}$

podmienka prierazu: $\boxed{\delta k > \frac{\Delta}{\hbar v_F}} \rightarrow \frac{eB}{\hbar} > \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}$

$\omega_c \sim \frac{eB}{m} \rightarrow$ podmienka prierazu: $\boxed{\hbar\omega_c > \frac{\Delta^2}{\varepsilon_F}}$ $\quad \varepsilon_F \sim m v_F^2$

→ analóg Zenerovho prierazu
POZOR: naivný odhad $\hbar\omega_c > \Delta$: nesprávny!

Podmienka de Haas-van Alphen:

$$\boxed{\frac{\hbar}{\tau_1}\ T \ll \hbar\omega_c \ll \frac{\Delta^2}{\varepsilon_F}}$$