Курс: Електронна структура та властивості низькорозмірних систем

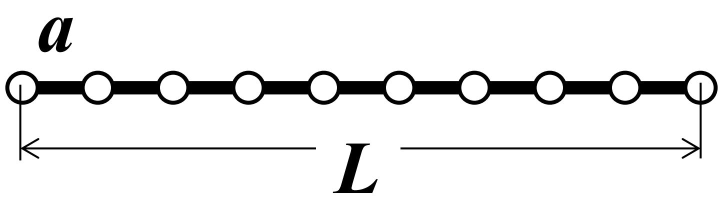
Лектор: Олександр Кордюк

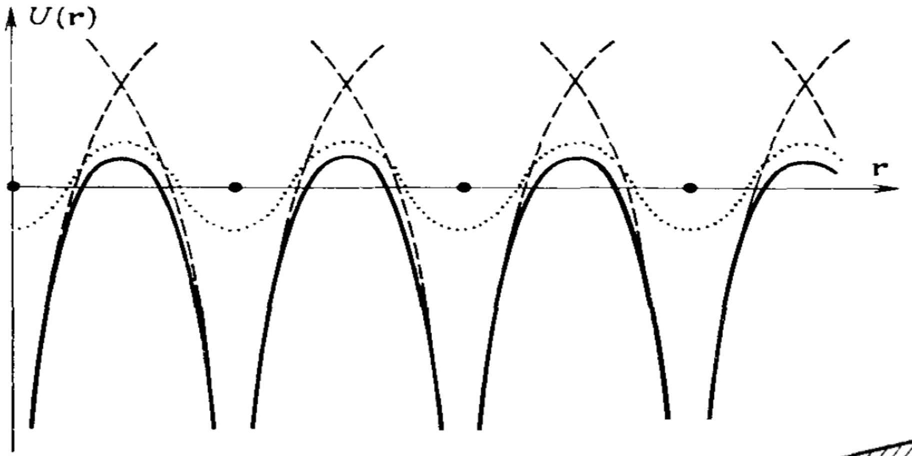
Лекція 7: **Напівкласика**

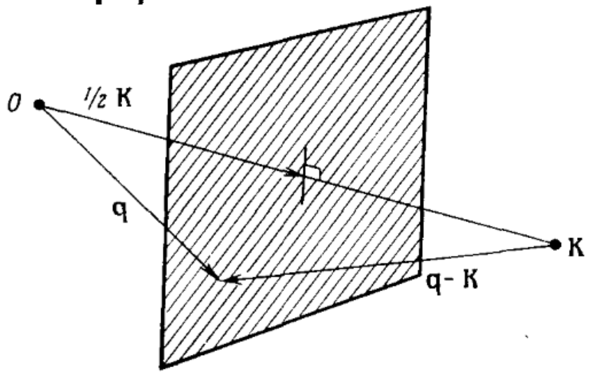
- Теорема Блоха - це **періодична** електронна структура
- Динаміка блохівських електронів під дією зовнішніх сил
- Електропровідність: рівняння Больцмана
- τ-наближення, затухання, власна енергія, спектральна функція
- Рух електронів поверхнею Фермі в магнітному полі - квантові осциляції
- Ефакт Хола та тензор провідності

Band gaps

У попередніх лекціях…



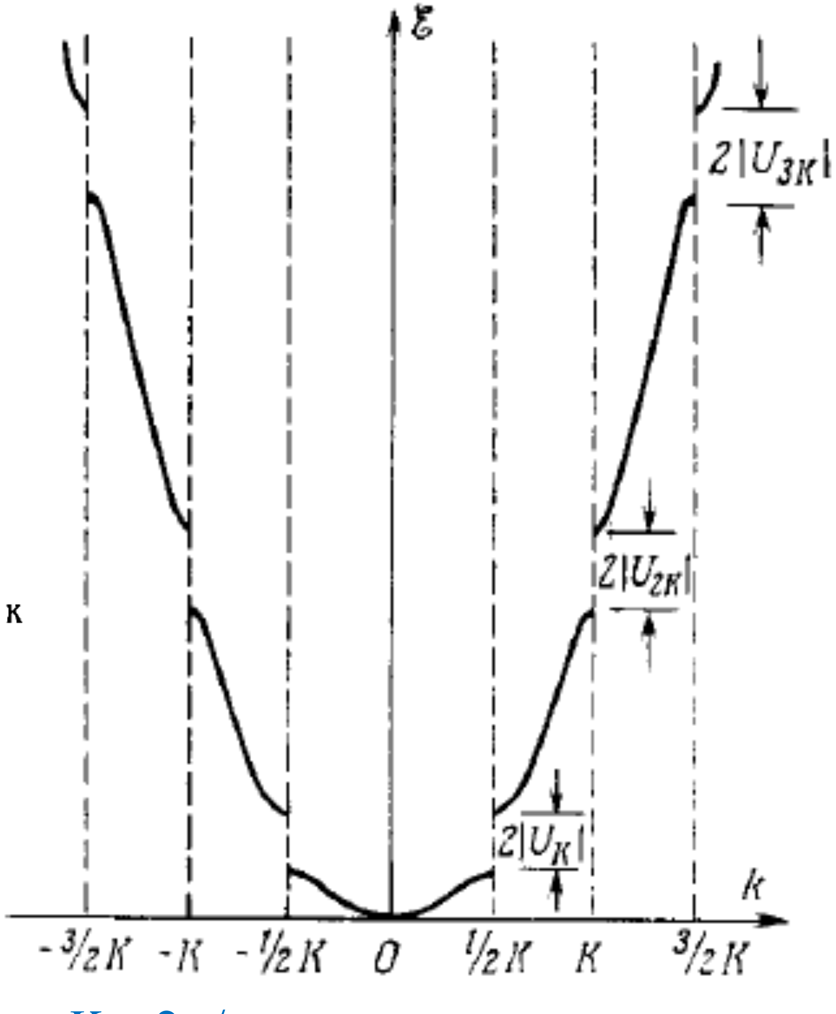




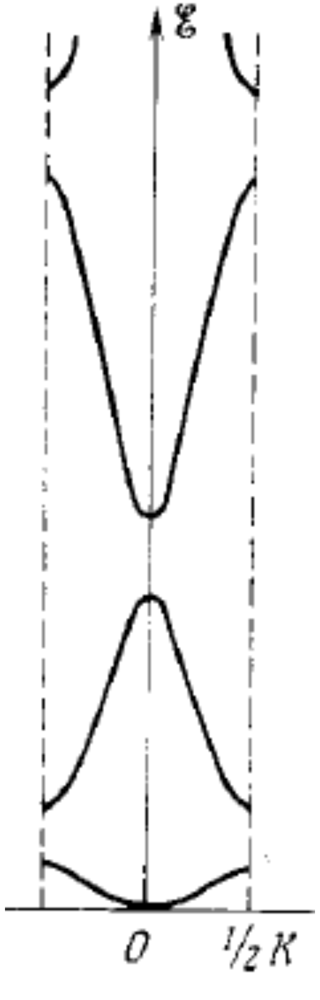
$$\begin{vmatrix} \mathcal{E} - \mathcal{E}^0_{\mathbf{q}} & -U_{\mathbf{K}} \\ -U^*_{\mathbf{K}} & \mathcal{E} - \mathcal{E}^0_{\mathbf{q}-\mathbf{K}} \end{vmatrix} = 0$$

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0_{\mathbf{q}})(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}) = |U_{\mathbf{K}}|^2$$

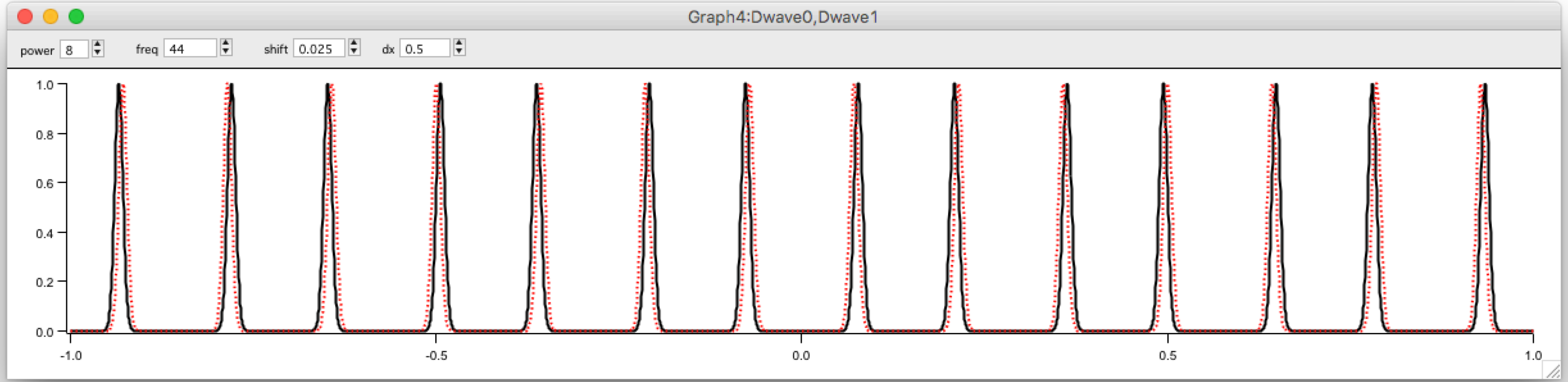
$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}(\mathcal{E}^0_{\mathbf{q}} + \mathcal{E}^0_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}) \pm \left[\left(\frac{\mathcal{E}^0_{\mathbf{q}} - \mathcal{E}^0_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}}{2} \right)^2 + |U_{\mathbf{K}}|^2 \right]^{1/2}$$

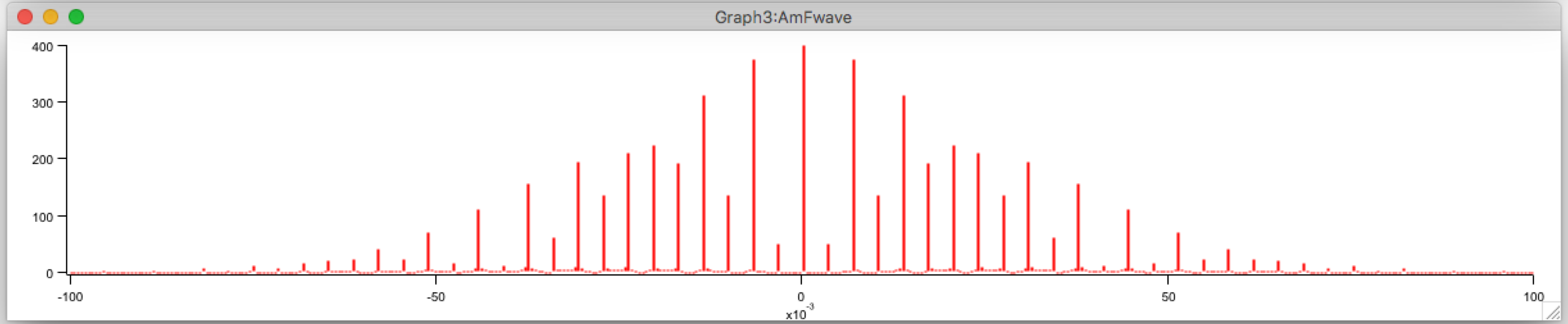


$K = 2\pi/a$

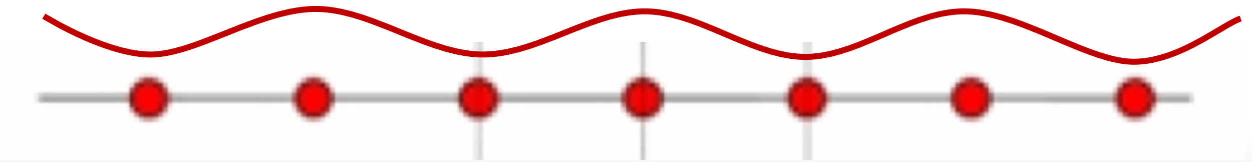


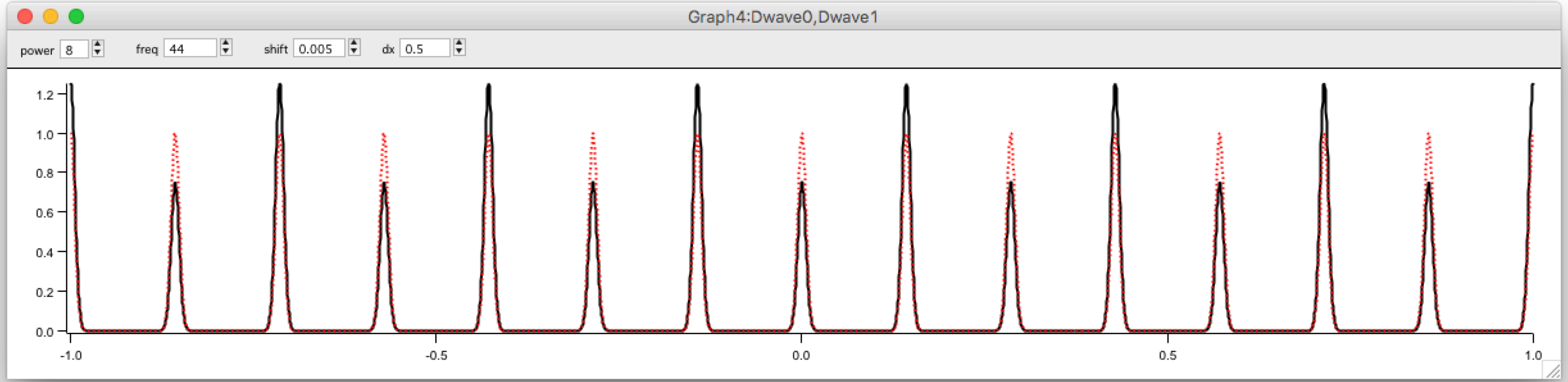
CDW band gaps

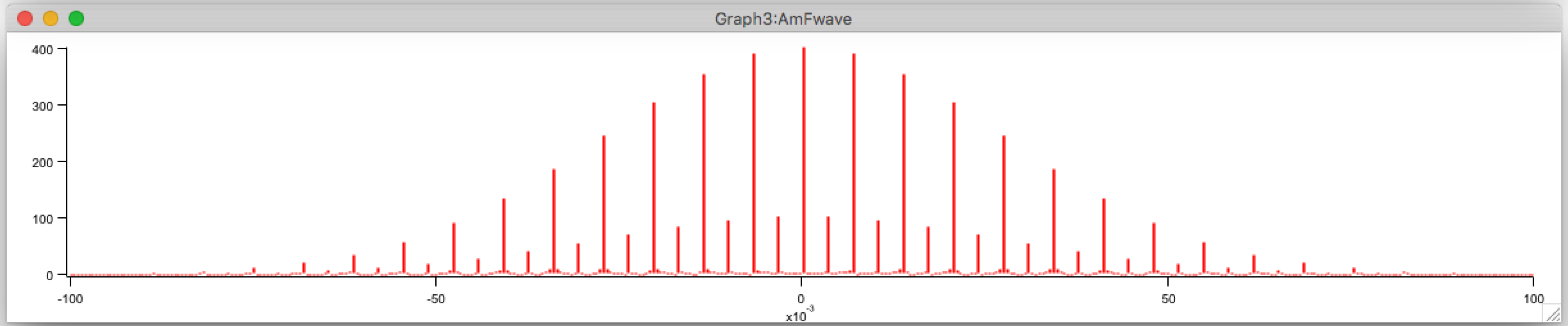


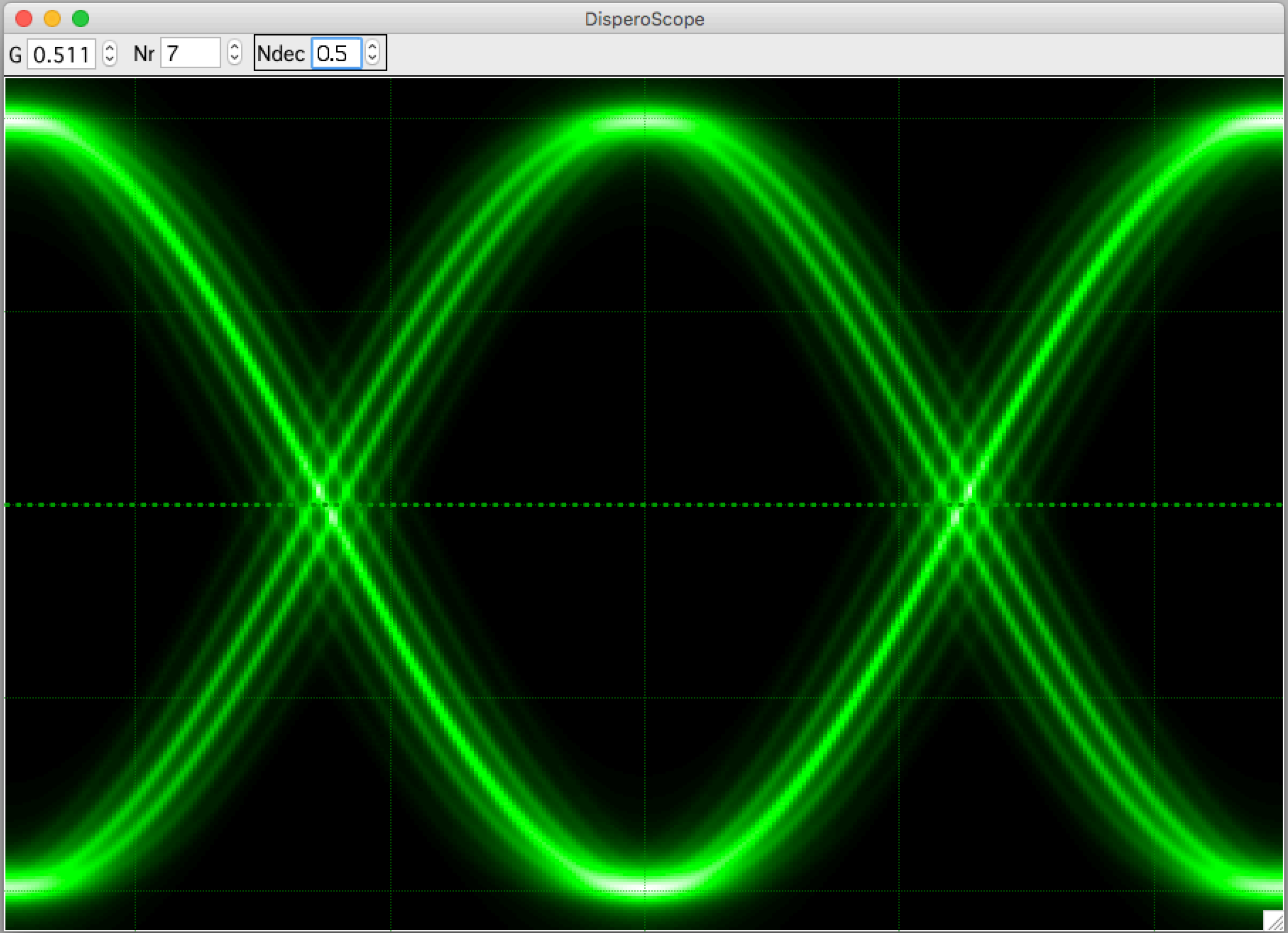


CDW band gaps

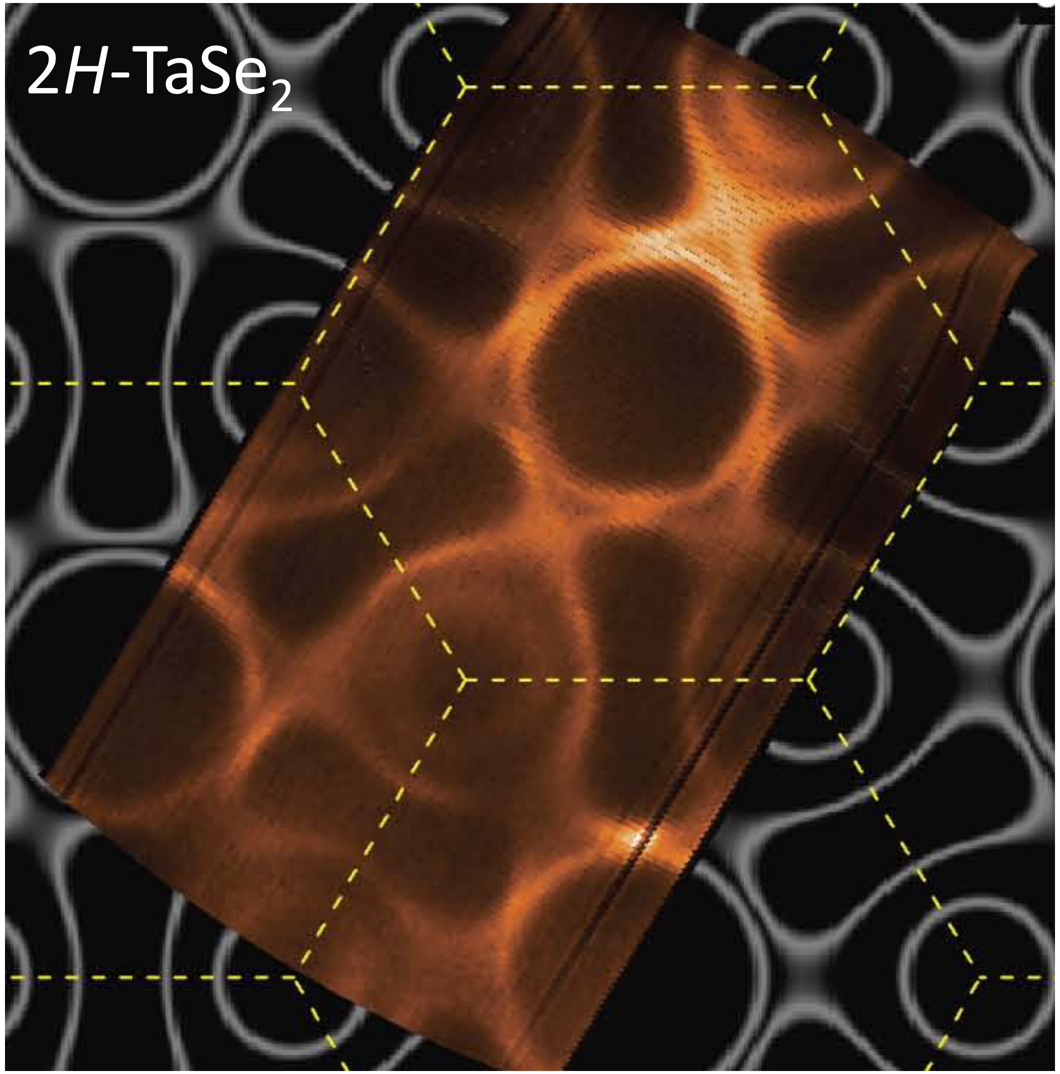


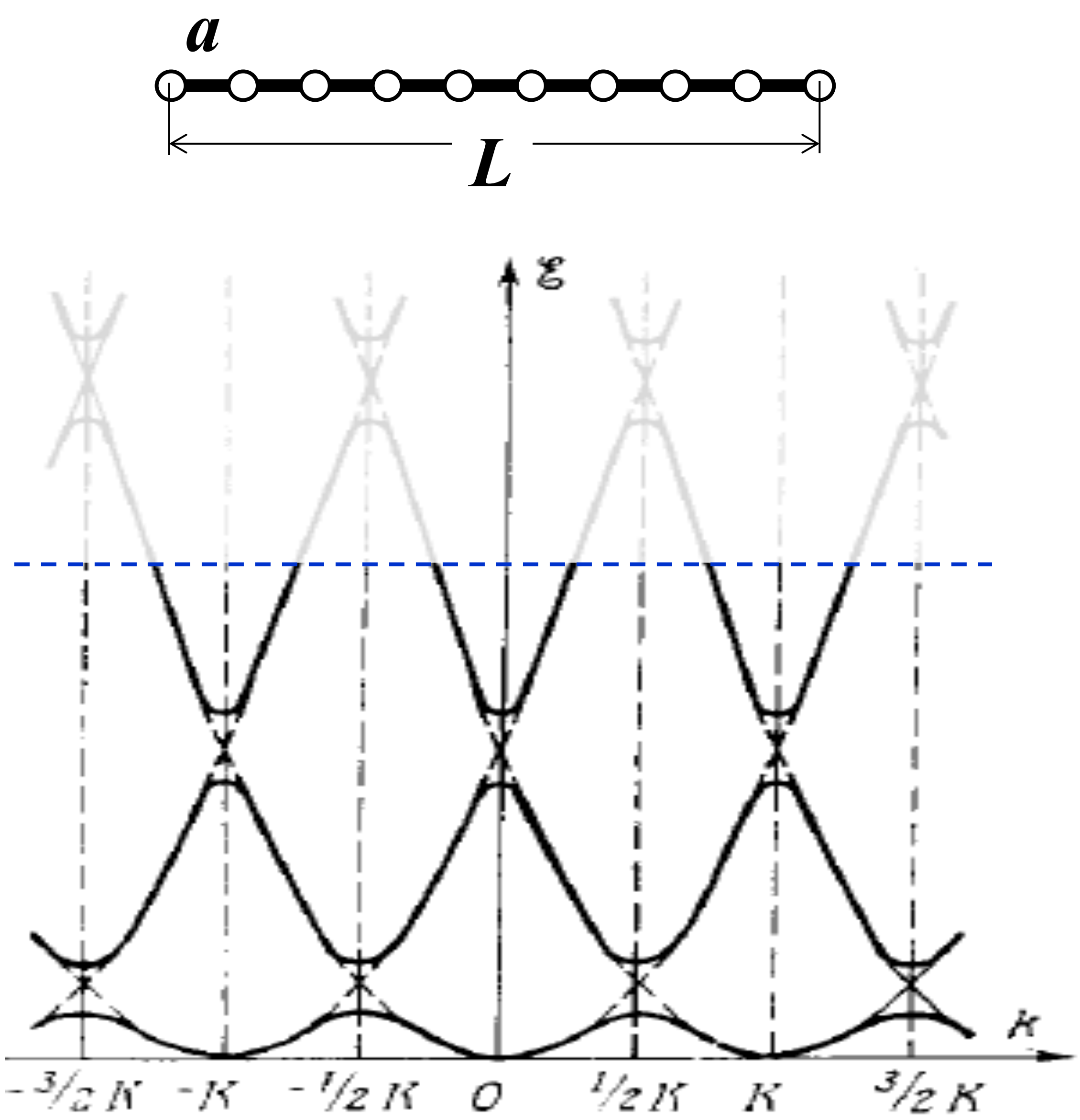




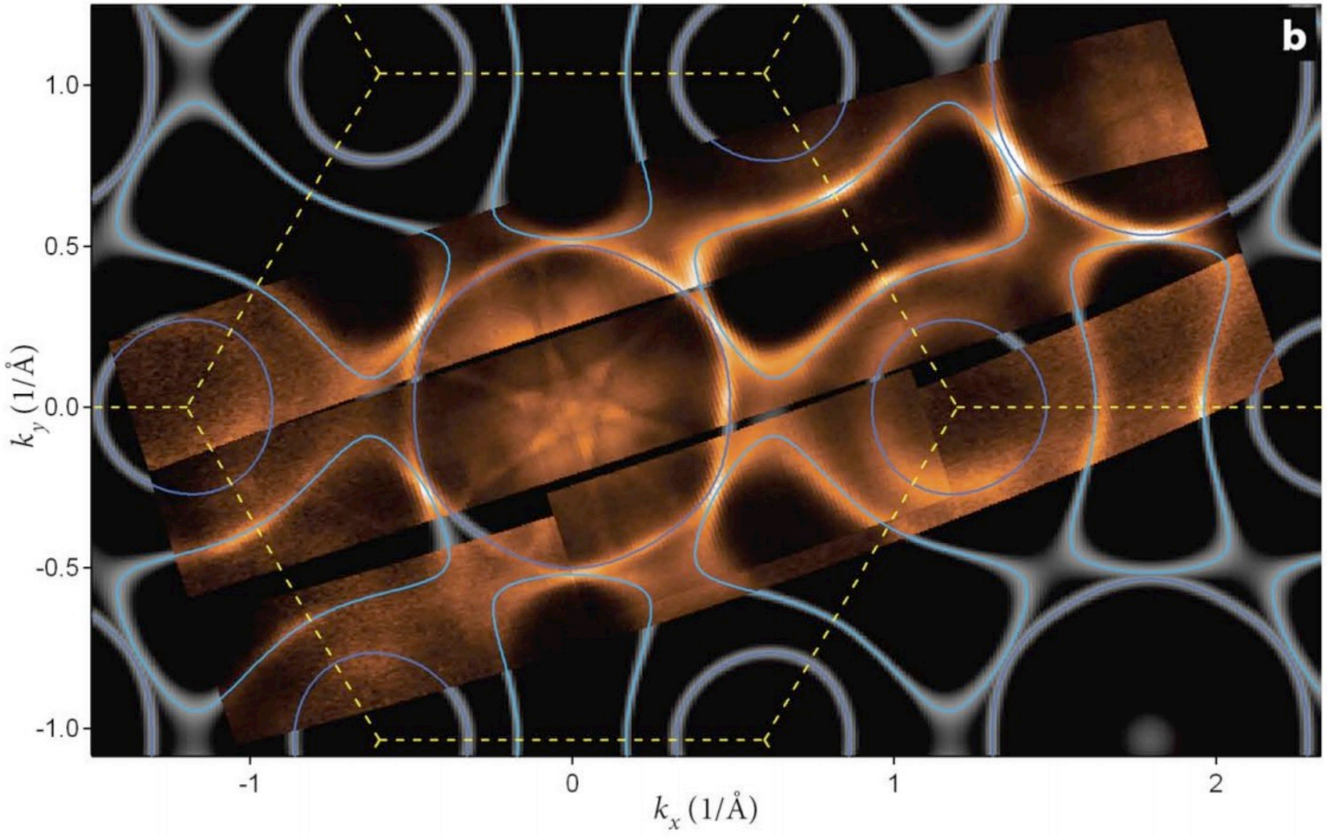

DisperoScope
G 0.511
Nr 7
Ndec 0.5

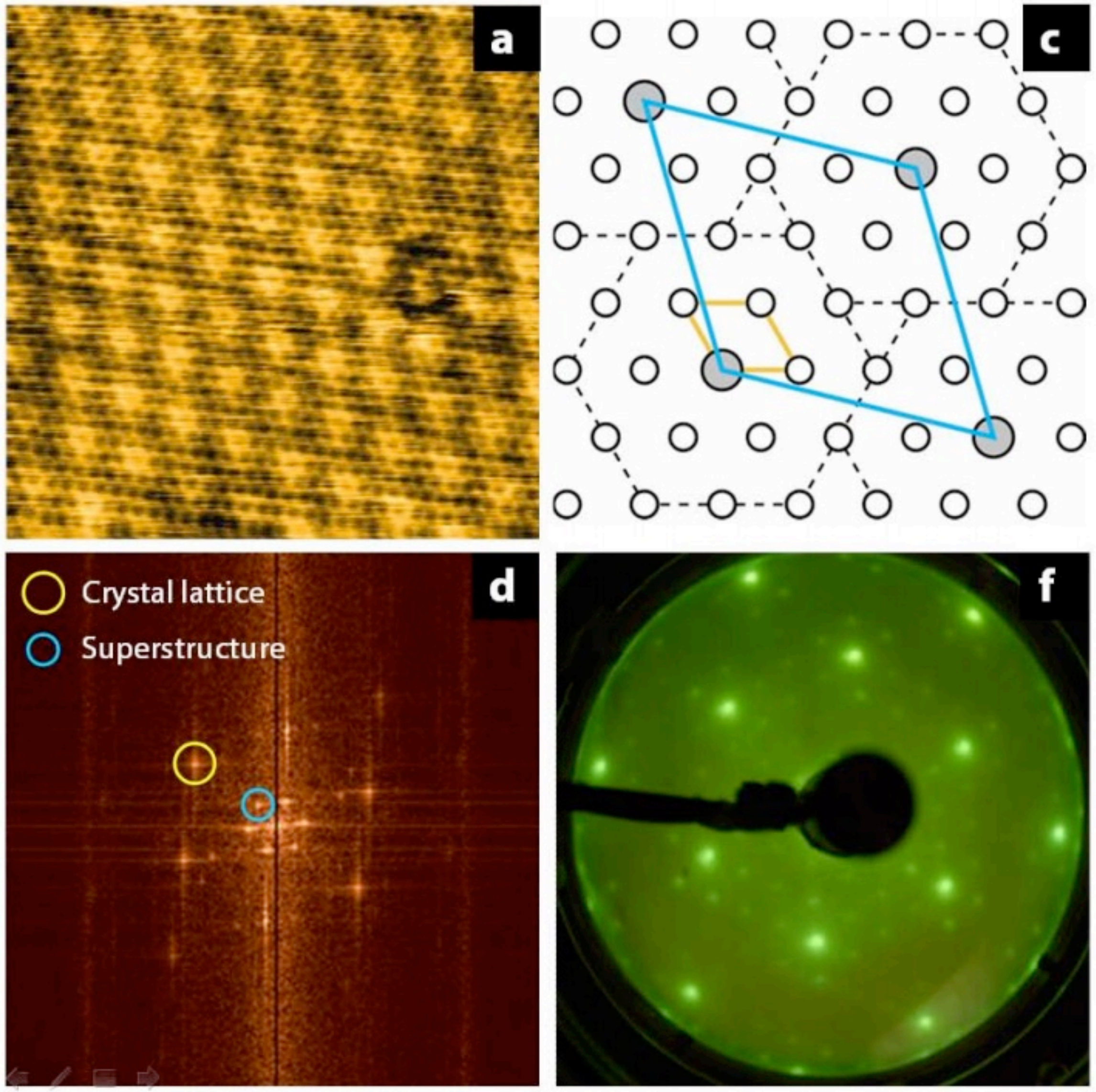
У попередніх лекціях…





$K = 2\pi/a$

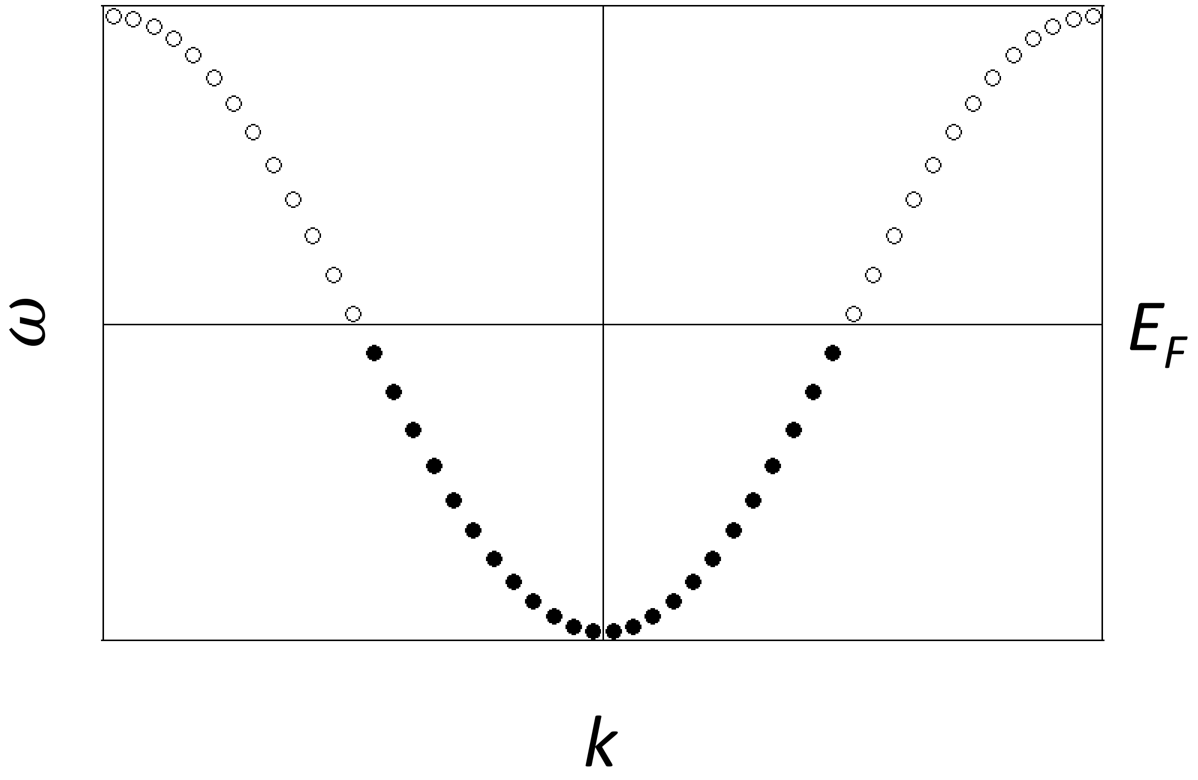




Cu-intercalated 2H-TaSe2

-> 2Hb-TaSe2

Напівкласика

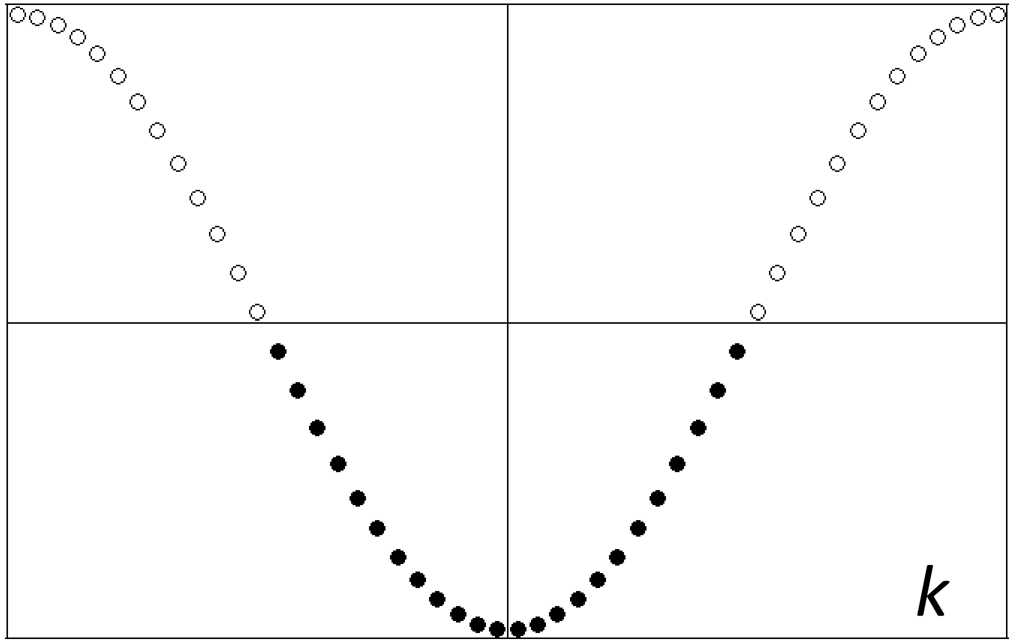


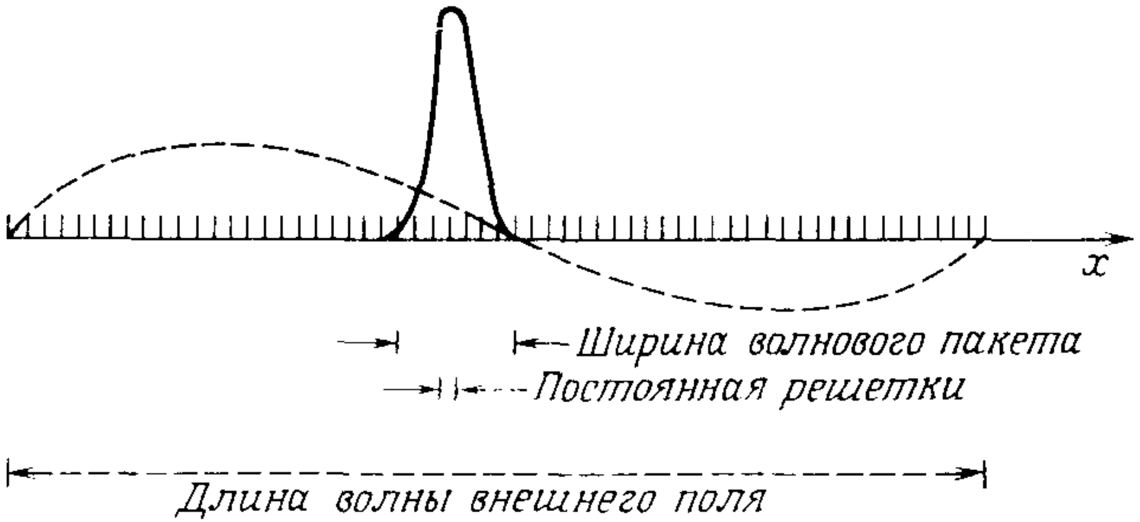
$$\boldsymbol{F} = \dot{\boldsymbol{p}} = \hbar\dot{\boldsymbol{k}} = -e\left[\boldsymbol{E} + \tfrac{1}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{H}\right]$$

$$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{r}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}}$$

Сравнение одноэлектронных стационарных уровней Зоммерфельда и Блоха

	Зоммерфельд	Блох
Квантовые числа (кроме спина)	$\mathbf{k}$ ($\hbar\mathbf{k}$ — импульс)	$\mathbf{k}$, n ($\hbar\mathbf{k}$ — квазиимпульс, n — номер зоны)
Область изменения квантовых чисел	$\mathbf{k}$ принимает все значения в k-пространстве, удовлетворяющие периодическому граничному условию Борна — Кармана	Для каждого n вектор $\mathbf{k}$ пробегает все волновые векторы, принадлежащие одной элементарной ячейке обратной решетки и удовлетворяющие граничному условию Борна — Кармана; n принимает бесконечное число дискретных значений
Энергия	$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$	Энергия $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ для заданного номера зоны n не может быть записана в виде простого явного выражения. Единственное общее свойство — периодичность в обратной решетке: $$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}+\mathbf{K}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k})$$
Скорость	Средняя скорость электрона на уровне с волновым вектором $\mathbf{k}$ равна $$\mathbf{v} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\mathbf{k}}$$	Средняя скорость электрона на уровне с номером зоны n и волновым вектором $\mathbf{k}$ равна $$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial\mathbf{k}}$$
Волновая функция	Волновая функция электрона с волновым вектором $\mathbf{k}$ есть $$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{V^{1/2}}$$	Волновая функция электрона с номером зоны n и волновым вектором $\mathbf{k}$ есть $$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$ где функция $u_{n\mathbf{k}}$ не может быть записана в виде простого явного выражения. Единственное ее общее свойство — периодичность в прямой решетке[а]) $$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathrm{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$





$$eEa \ll \frac{[\mathscr{E}_{\text{gap}}(\mathbf{k})]^2}{\mathscr{E}_F},$$

$$\hbar\omega_c \ll \frac{[\mathscr{E}_{\text{gap}}(\mathbf{k})]^2}{\mathscr{E}_F}.$$

$$\omega_c = \frac{eH}{mc}$$

$E = \rho j = 100$ мкОм·см 10^2 А/см^2 $= 10^{-2}$ В/см

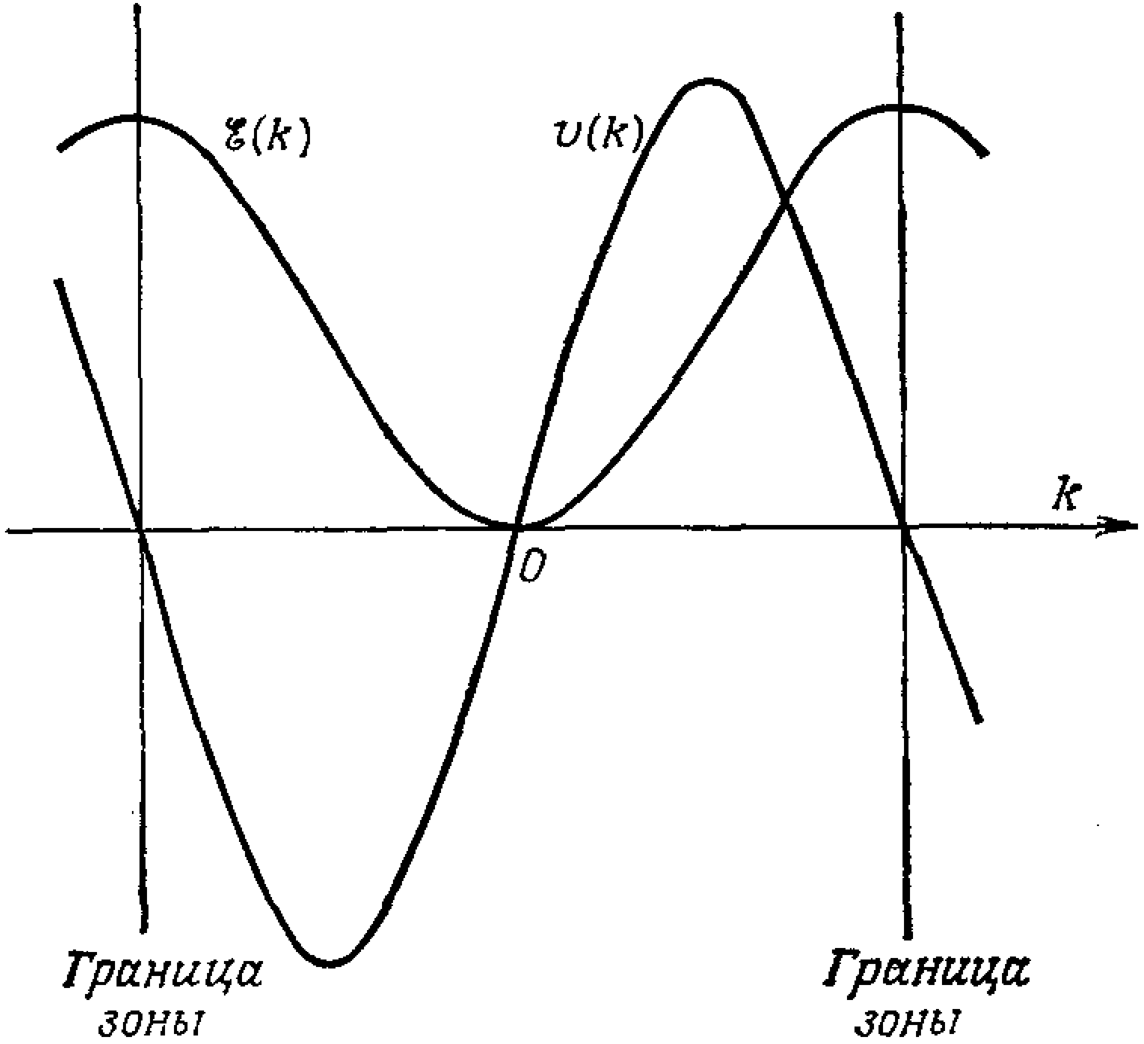
$eEa \sim 10^{-10}$ эВ

$\hbar\omega_c \sim 10^{-4}$ эВ $\quad H \sim 10^4$ Гс

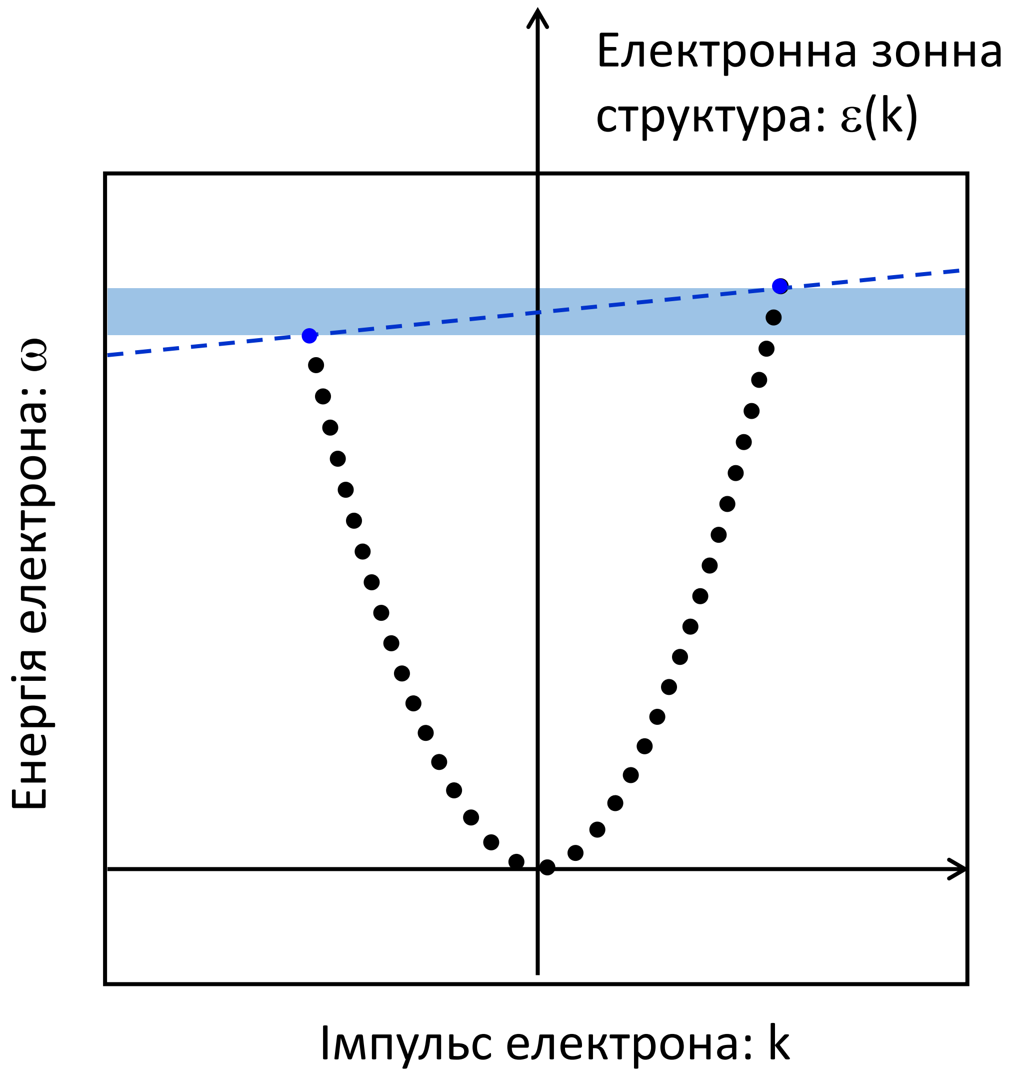
нарушается для щелей шириной 10^{-2} эВ

$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}} = -e\boldsymbol{E}$$

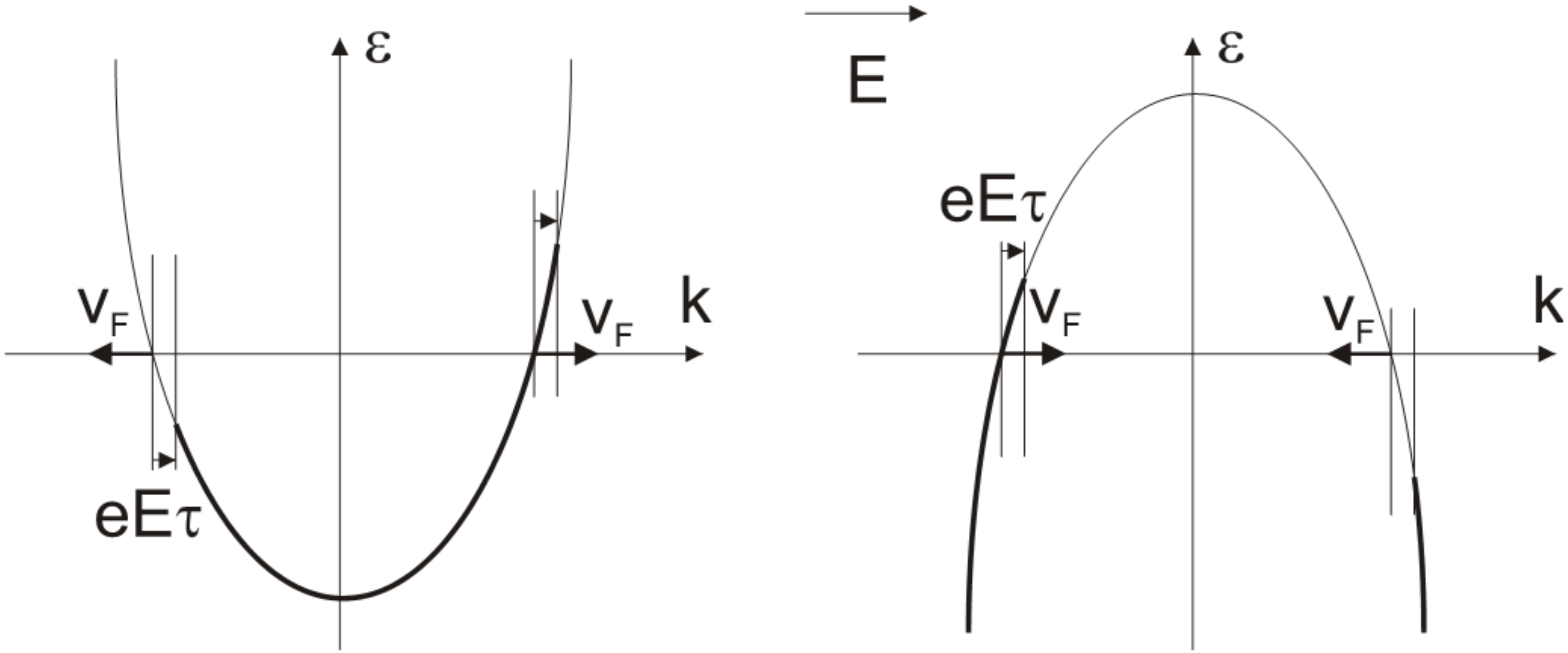
$$\boldsymbol{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}}$$



Електричне поле -> електричний струм



$$f(\hbar\boldsymbol{k}) = f^0(\hbar\boldsymbol{k} - e\boldsymbol{E}\tau)$$



$$f^0(\vec{k}) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\dfrac{\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon_F}{k_Б \cdot T}\right)}$$

Если приложить поле $\vec{E}$, то функция распределния изменится: $f = f^0 + f^1$, где

$$f^1 = -e \cdot \left(\vec{E} \bullet \frac{df}{d\vec{p}}\right) \cdot \tau = -e \cdot \vec{E} \cdot \frac{df}{d\varepsilon} \cdot \frac{d\varepsilon}{d\vec{p}} \cdot \tau = -e \cdot \tau \cdot \frac{df}{d\varepsilon} \cdot \left(\vec{E} \square \vec{v}\right).$$

Что в пределе малых полей соответствует $f(\vec{k}) = f^0(\vec{k} - e\vec{E}\tau)$.

D. Evtushinsky 2008

Ур-е Больцмана:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t},$$

при этом в равновесии $\dfrac{df}{dt} = 0$.

τ–приближение:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f^0}{\tau} \qquad (1)$$

$\dfrac{\partial \vec{p}}{\partial t}$ - это просто сила:

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = \vec{F} = -e\vec{E} \qquad (2)$$

Подставляем (1) и (2) в ур-е Больцмана и учитываем что $\dfrac{df}{dt} = 0$:

$$-\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot e\vec{E} - \frac{f - f^0}{\tau} = 0 \qquad (3)$$

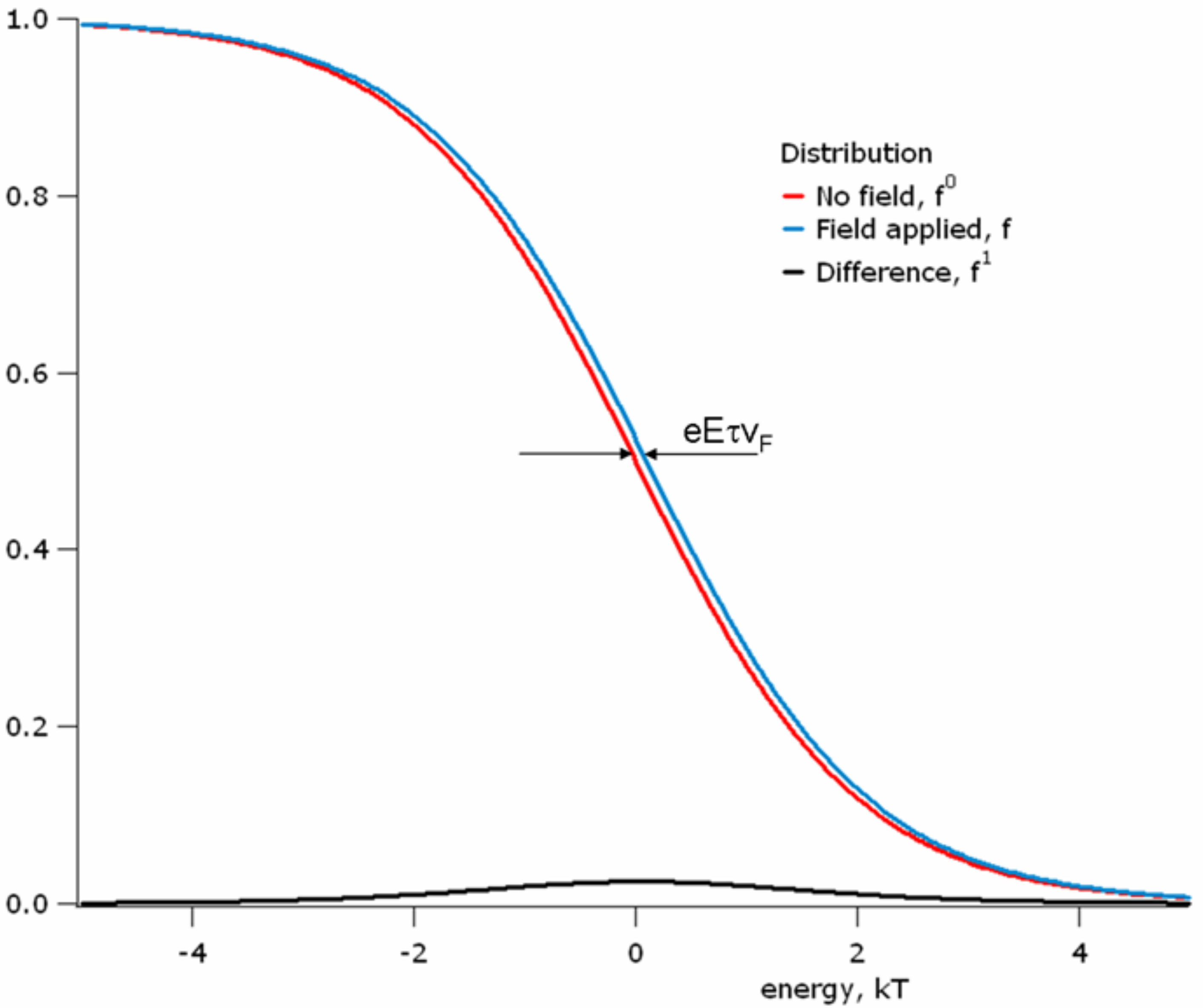
Пусть $f = f^0 + f^1$, где $f^1 << f^0$. Тогда (3) принимает вид

$$-\frac{\partial (f^0 + f^1)}{\partial \vec{p}} \cdot e\vec{E} - \frac{(f^0 + f^1) - f^0}{\tau} = 0$$

Пренебрегая $\dfrac{\partial f^1}{\partial \vec{p}}$, получаем

$$f^1 = -e \cdot \left(\vec{E} \bullet \frac{df}{d\vec{p}} \right) \cdot \tau$$

D. Evtushinsky 2008



$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}} = -e\boldsymbol{E}$$

$$\boldsymbol{v} = \frac{\partial\varepsilon(\boldsymbol{k})}{\hbar\partial\boldsymbol{k}}$$

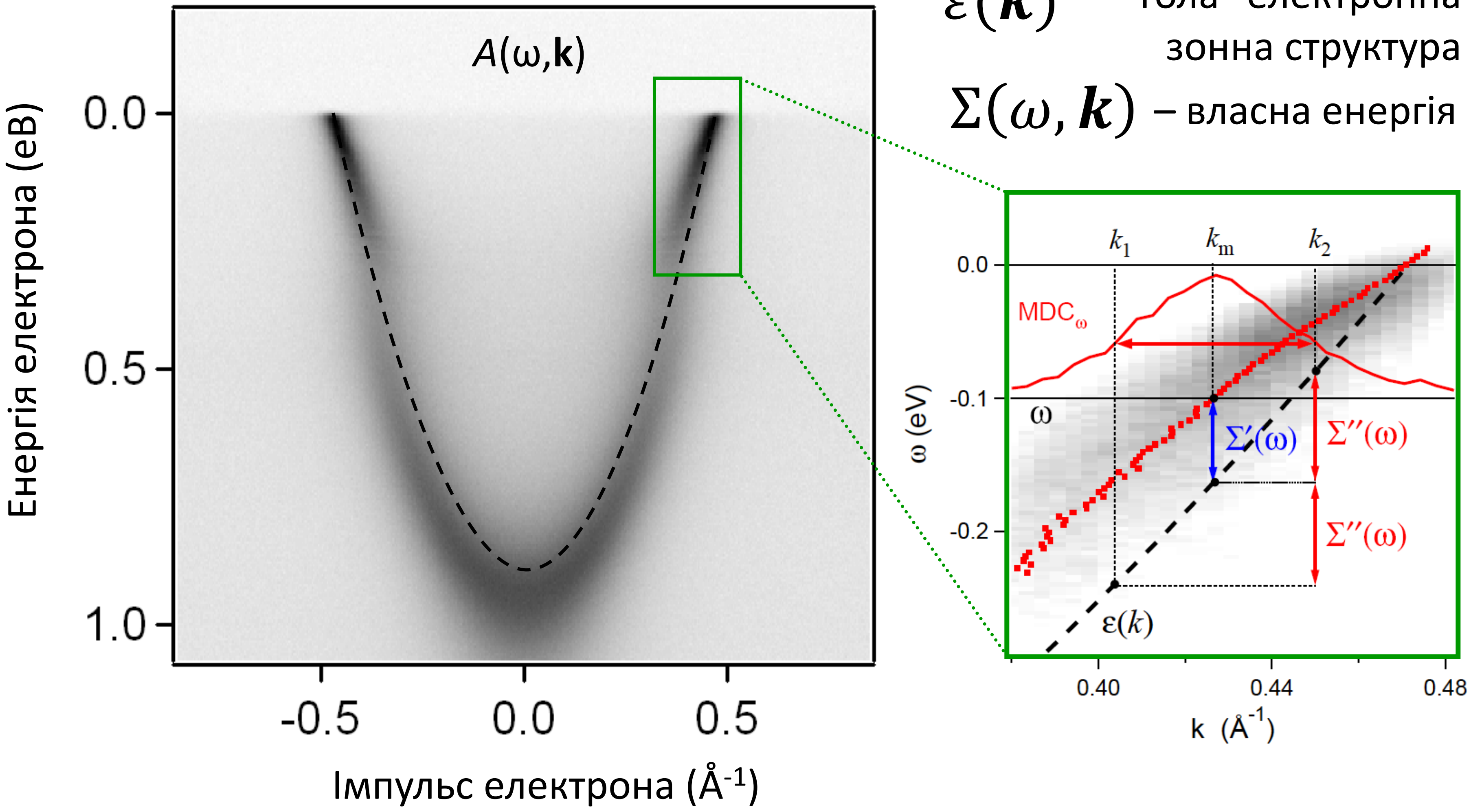
$$e\boldsymbol{E}\tau\boldsymbol{v}_F \ll kT$$

$$\boldsymbol{j} = en\boldsymbol{v} = \sigma\boldsymbol{E}$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi L_c h} \int \tau(\mathbf{k}) v_{\mathrm{F}}(\mathbf{k})\, \mathrm{d}\, k$$

Спектральна функція

$$A(\omega,\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi}\frac{\Sigma''(\omega)}{(\omega-\varepsilon(\mathbf{k})-\Sigma'(\omega))^2+\Sigma''(\omega)^2}$$



$\varepsilon(\boldsymbol{k})$ – "гола" електронна зонна структура

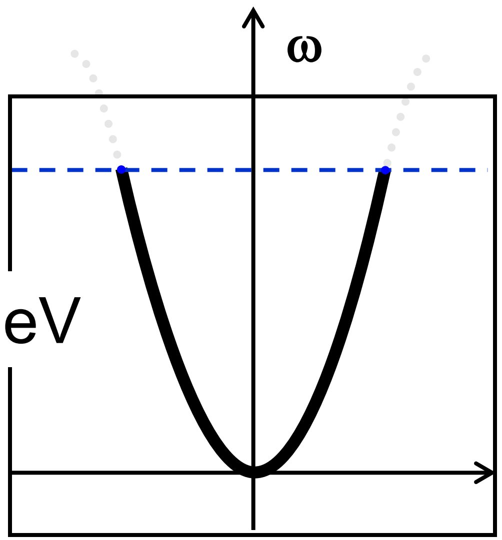
$\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})$ – власна енергія

$$\Sigma'' = \hbar/\tau$$

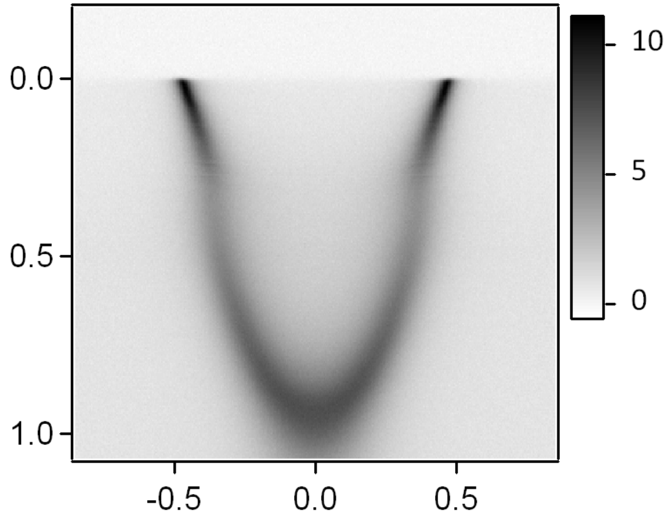
10 meV – 30 fs

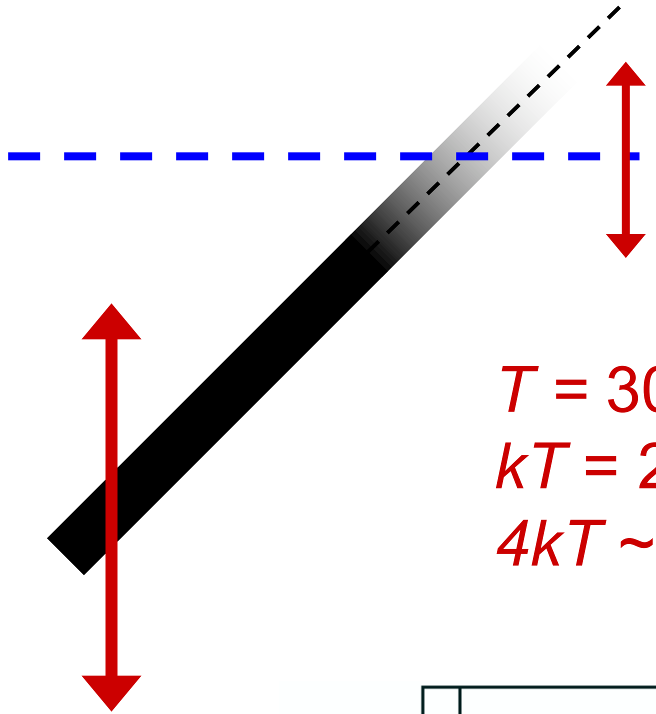
Kordyuk *PRB* 2005

Energy scales

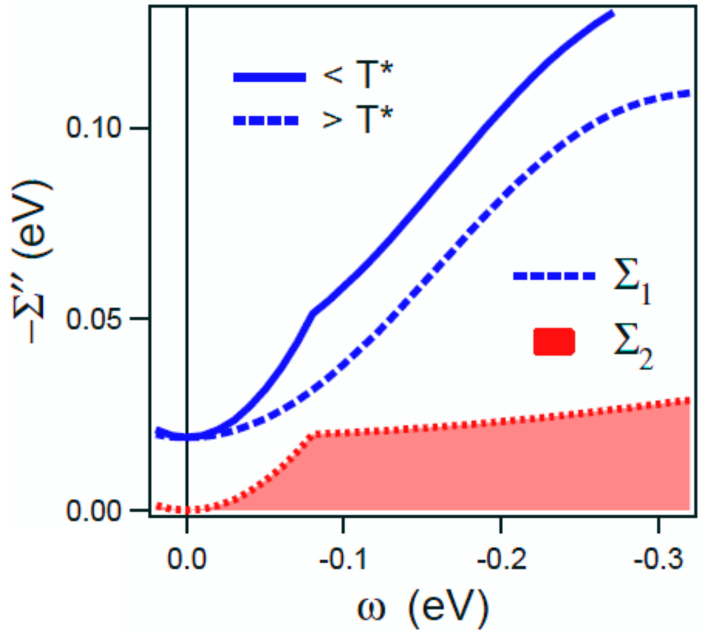


~1 eV





T = 300 K
kT = 26 meV
$4kT$ ~ 0.1 eV



$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathscr{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},$$

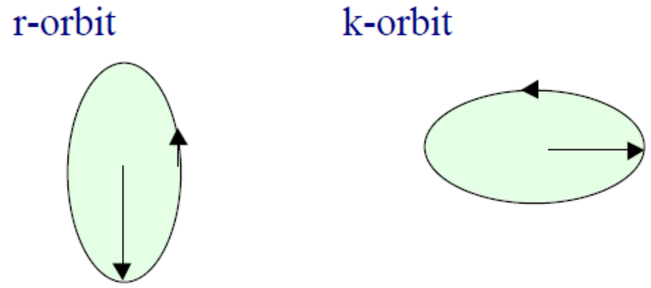
$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\frac{1}{c}\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}.$$

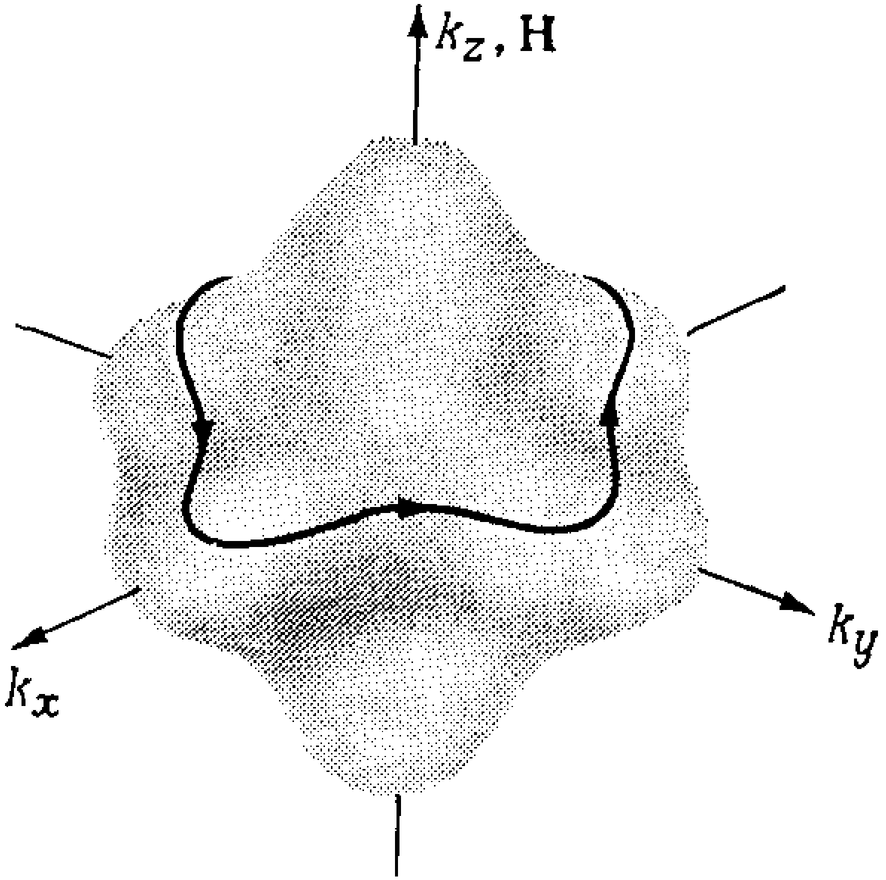
$$\vec{a} \times \left(\vec{b} \times \vec{c}\right) = \vec{b}\,(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c}\left(\vec{a} \cdot \vec{b}\right)$$

$$\hat{\mathbf{H}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{eH}{c}(\dot{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \dot{\mathbf{r}})) = -\frac{eH}{c}\dot{\mathbf{r}}_{\perp}$$

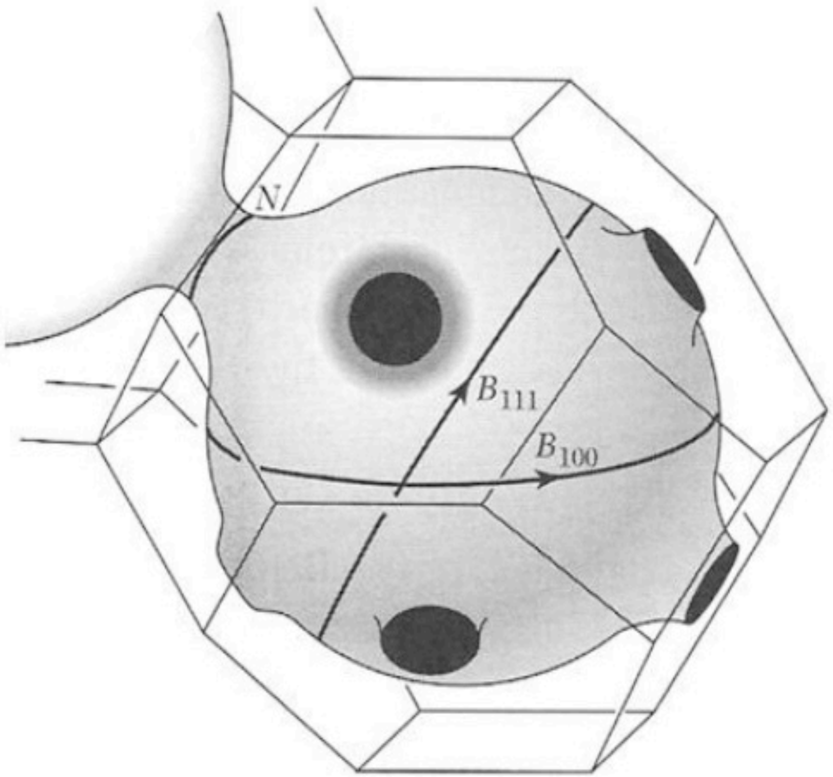
$$\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{r})$$

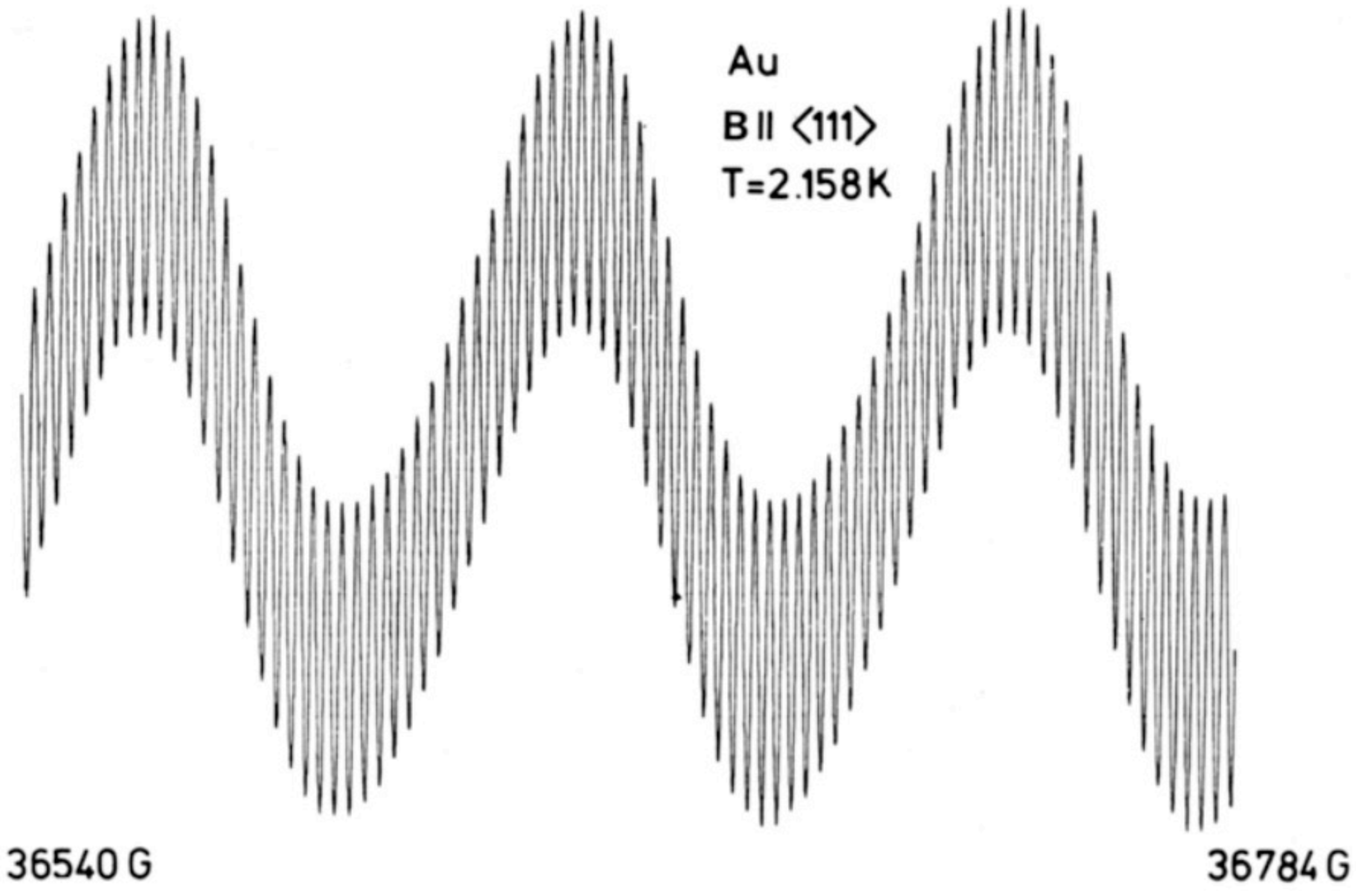
$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar c}{eH}\hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0))$$





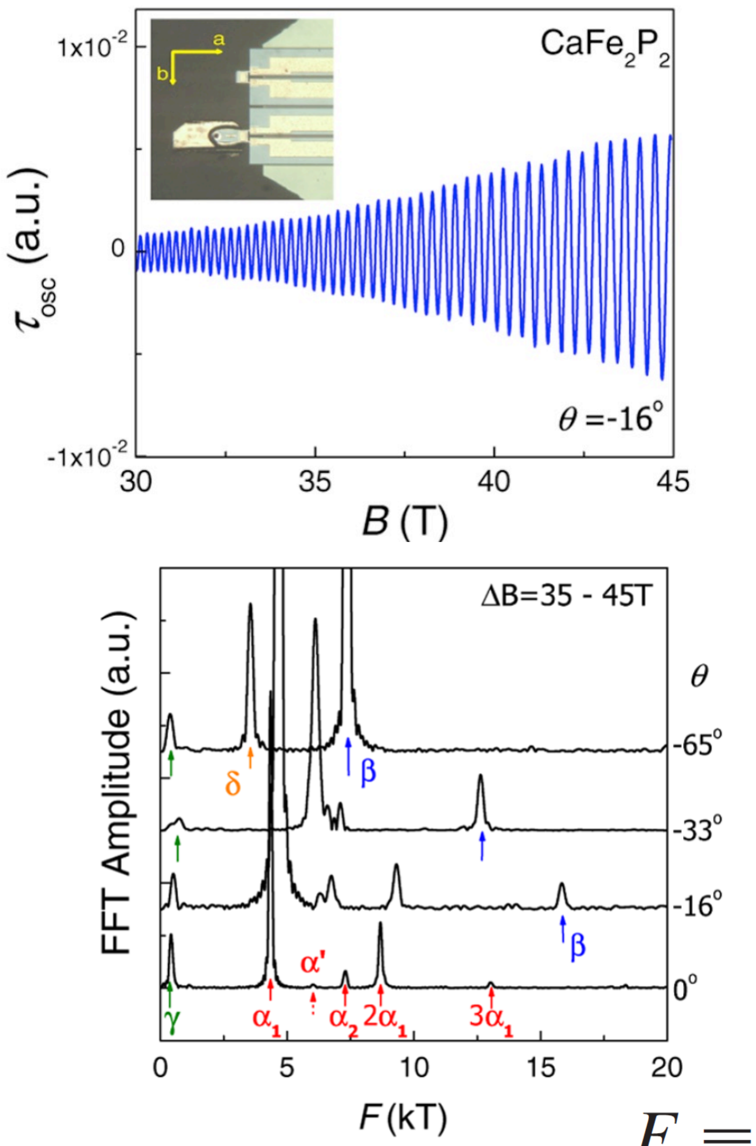
de Haas-van Alphen effect

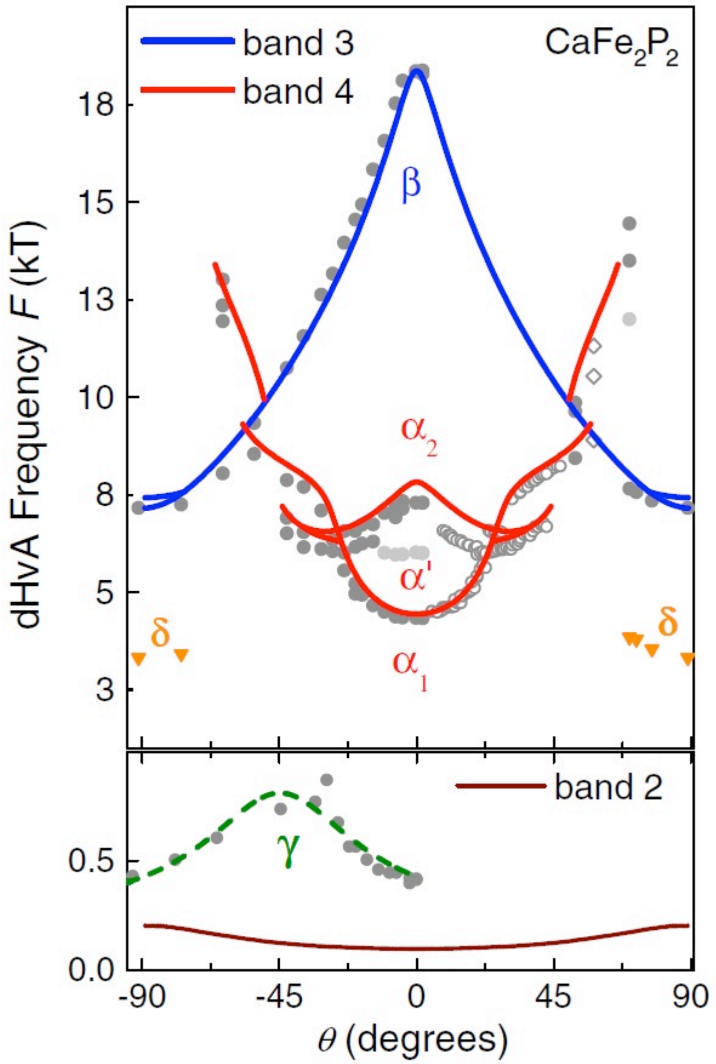


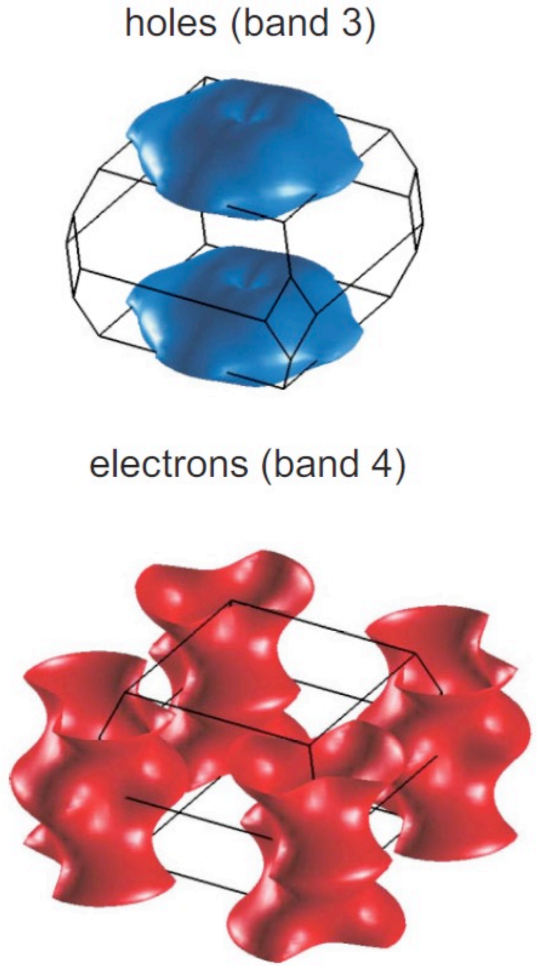


$$F = (\hbar/2\pi e)A_k$$

Torque Magnetometry of $CaFe_2P_2$

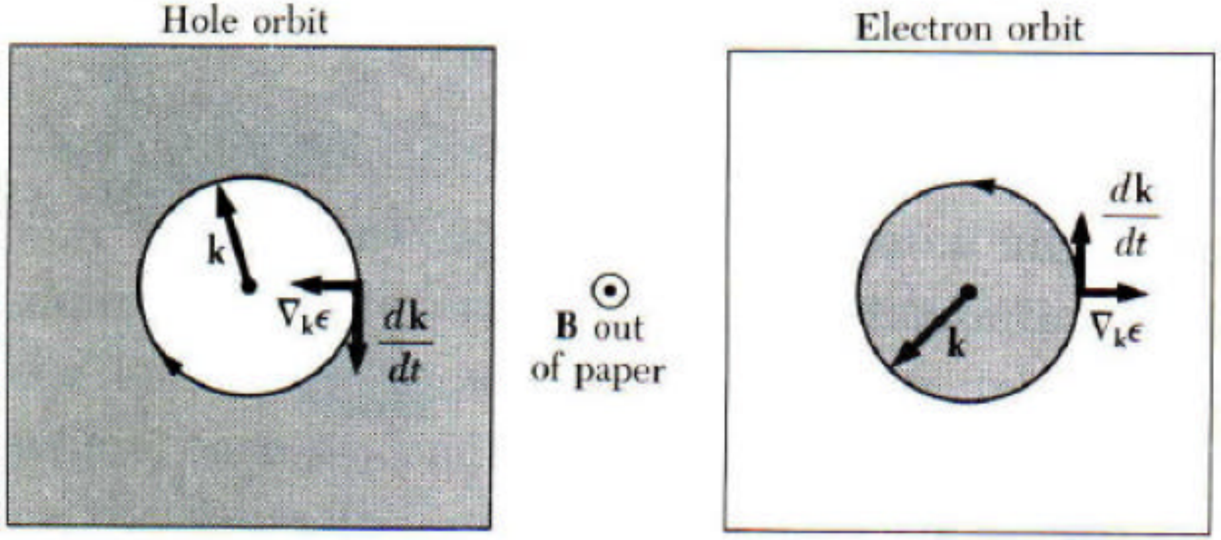






$$F = (\hbar/2\pi e)A_k$$

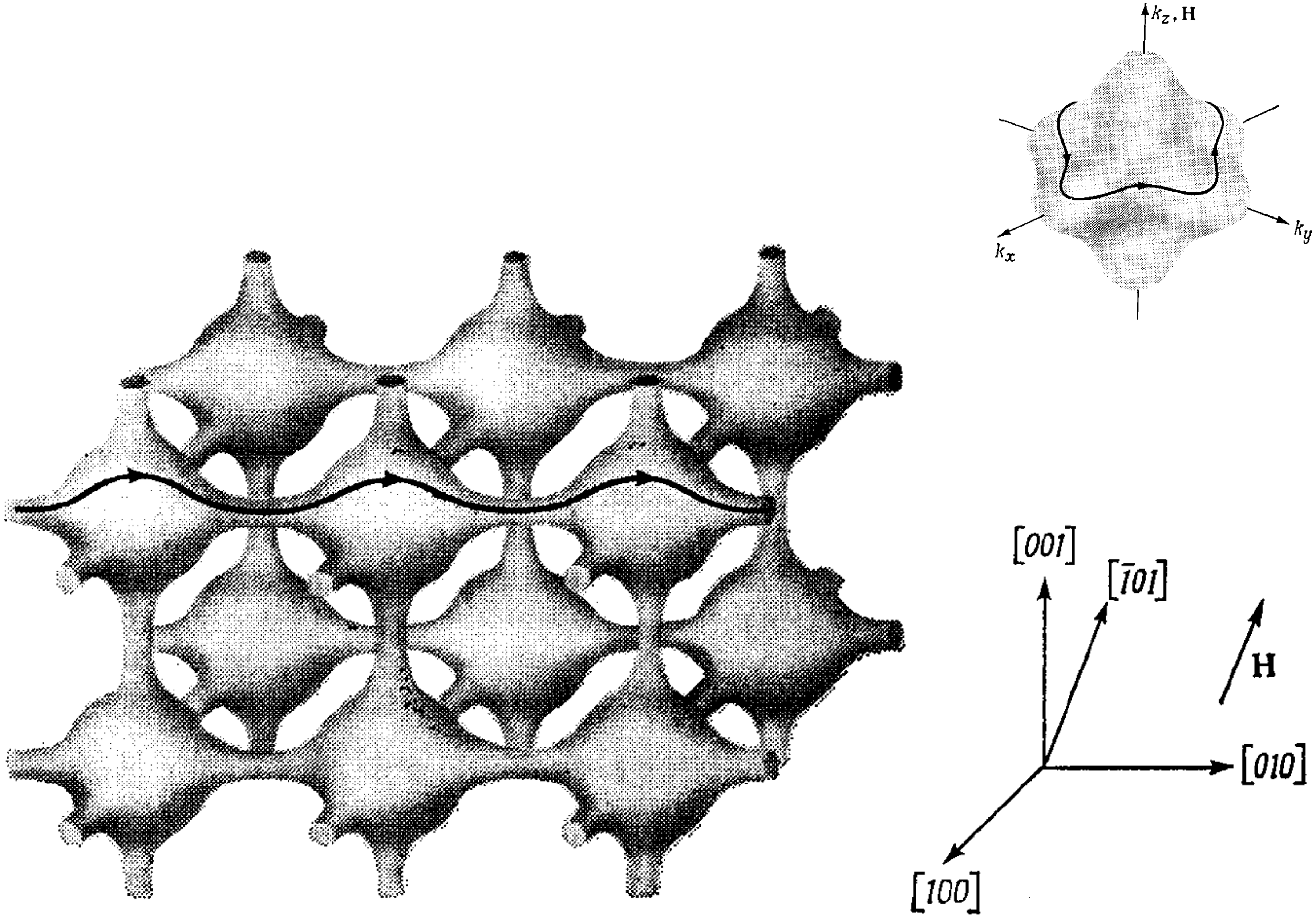
Amalia Coldea *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026404 (2009)



smaller k	smaller k

smaller k	smaller k
higher energy	lower energy

→ The "hill" is always on one's right hand side

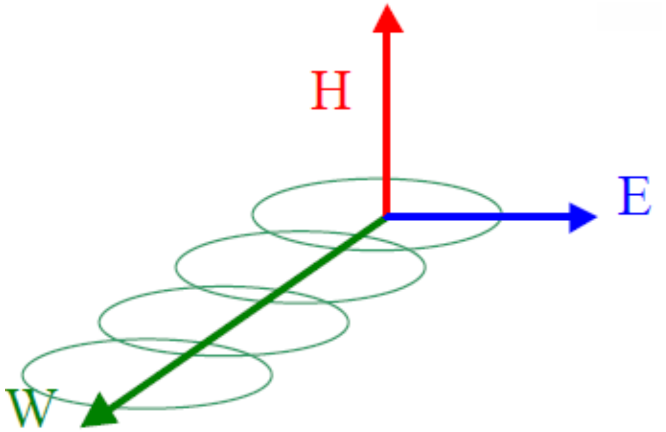


k_z, H
k_x
k_y
[001]
[$\bar{1}$01]
H
[010]
[100]

Bloch electron in crossed E and H fields (both uniform)

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E} - e\frac{\dot{\vec{r}}}{c}\times\vec{H}$$

$$= -\frac{e}{c\hbar}\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial\vec{k}}\times\vec{H}$$



where $\tilde{\varepsilon}(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}) - \hbar\vec{k}\cdot\vec{w}, \quad \vec{w} \equiv c\frac{E}{H}\hat{E}\times\hat{H}$

Real space orbit

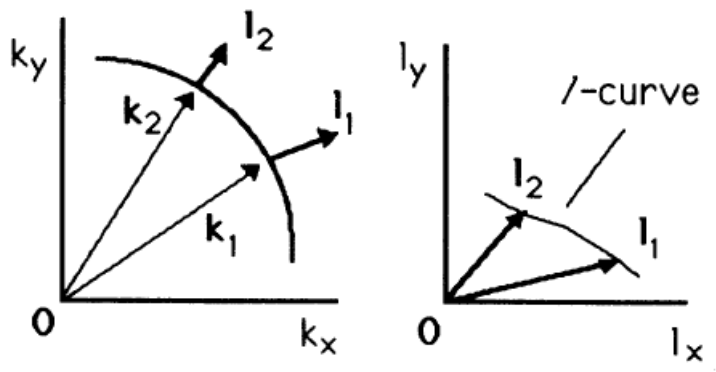
$$\hbar\frac{d}{dt}\left(\vec{k} + \frac{e}{\hbar}\vec{E}t\right) = -e\frac{\dot{\vec{r}}}{c}\times\vec{H}$$

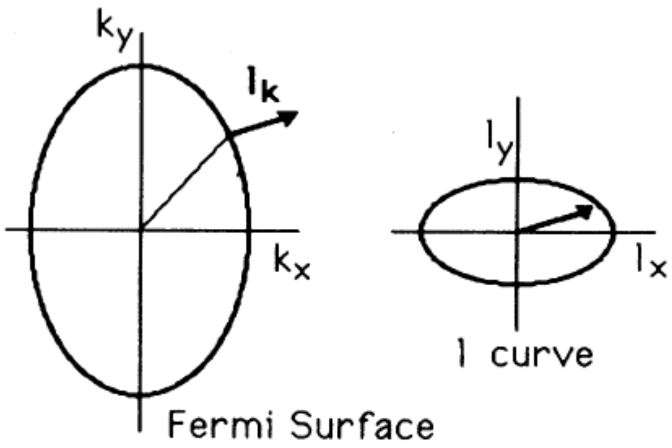
$$\rightarrow \quad \dot{\vec{r}} = \lambda_B^2\frac{d}{dt}\left(\vec{k} + \frac{e}{\hbar}\vec{E}t\right)\times\hat{H}$$

$$\rightarrow \quad \vec{r}(t) - \vec{r}(0) = \lambda_B^2\left(\vec{k}(t) - \vec{k}(0)\right)\times\hat{H} + \overbrace{c\frac{E}{H}\left(\hat{E}\times\hat{H}\right)t}^{\text{steady E×H drift}}$$

$\hbar \mathbf{v_k} = \partial \varepsilon_\mathbf{k} / \partial \mathbf{k}$ and $\tau_\mathbf{k}$ is the relaxation time

$$\boldsymbol{l}(\mathbf{k}) = \mathbf{v_k} \tau_\mathbf{k}$$

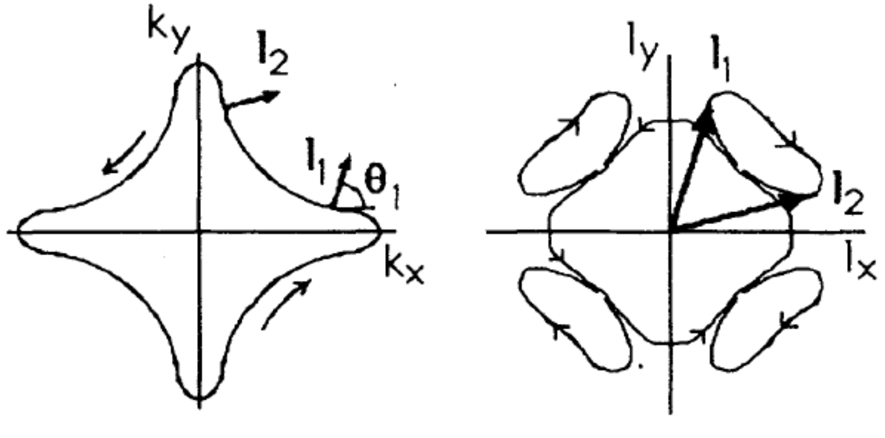




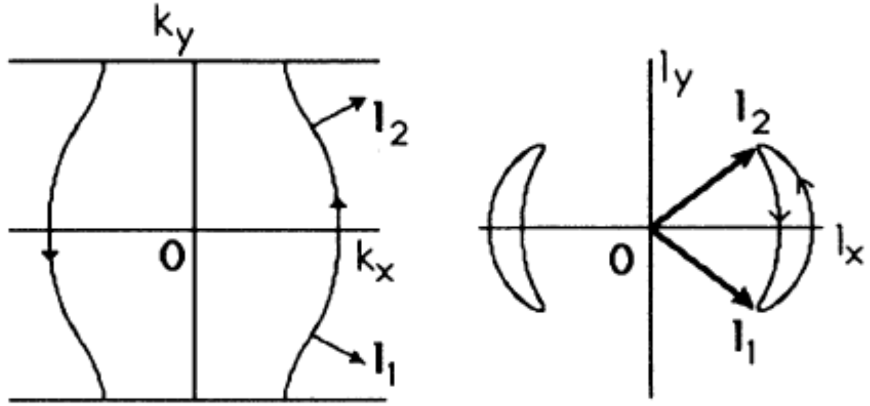
$$\sigma_{xy}=2(e^3/\hbar)B\sum_{\mathbf{k}}\left[\frac{-\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial\varepsilon}\right](v_y\tau_{\mathbf{k}})\left[v_y\left[\frac{\partial}{\partial k_x}\right]-v_x\left[\frac{\partial}{\partial k_y}\right]\right](v_x\tau_{\mathbf{k}})$$

$$\sigma_{xy}=(e^3/2\pi^2\hbar)\int dk_t\,|\mathbf{v}|^{-1}[v_y\tau_{\mathbf{k}}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\nabla(v_x\tau_{\mathbf{k}})]$$

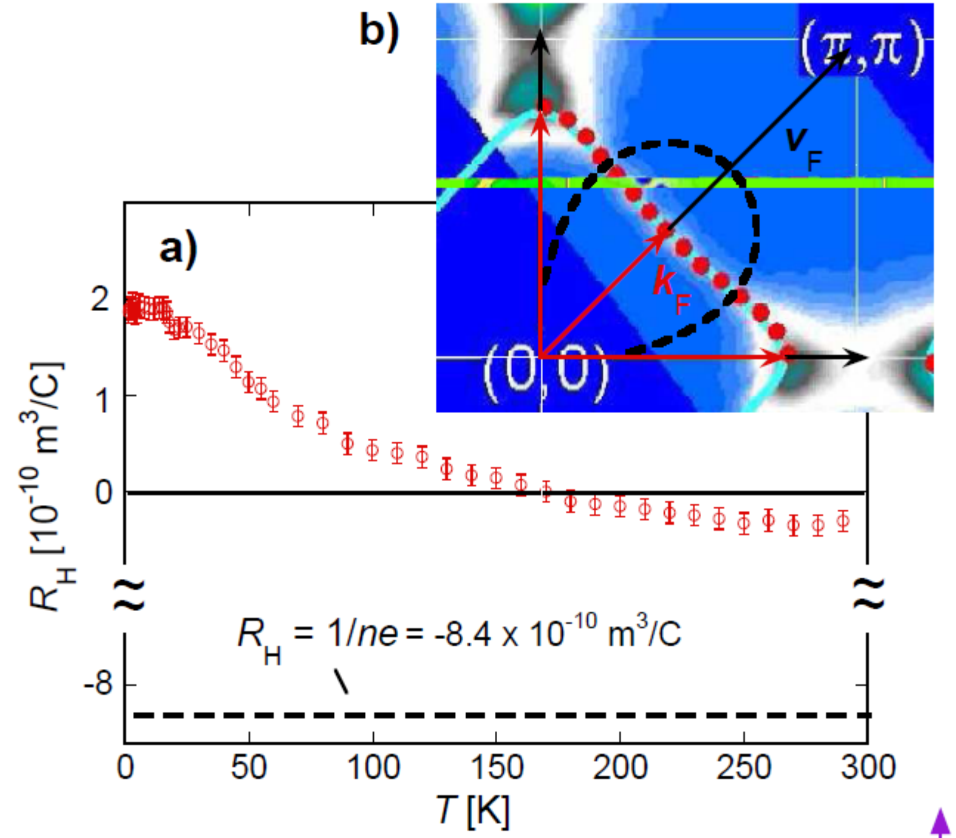
$$\boxed{\sigma_{xy}=(e^2/h)A_l/(\pi l_B^2)}\qquad A_l=(\mathbf{B}/B)\cdot\int d\mathbf{l}\times\mathbf{l}/2$$

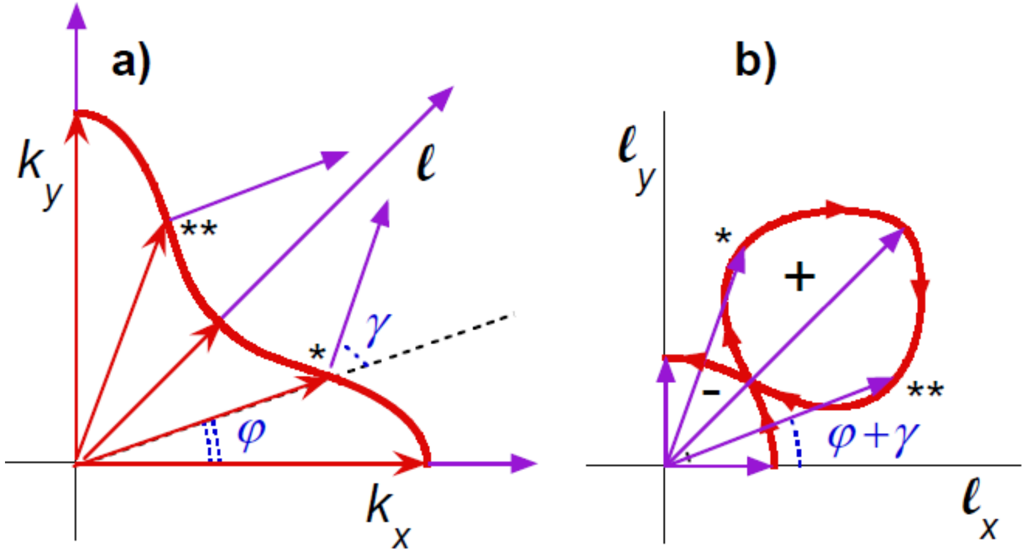


Fermi Surface　　l curve



Fermi Surface　　l curve





Narduzzo arXiv:0707.4601

$$R_H \equiv E_H/(B \cdot j)$$

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}$$

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}}{B\sigma_{xx}^2}$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi L_c h} \int \tau(\mathbf{k}) v_{\mathrm{F}}(\mathbf{k})\, \mathrm{d}k$$

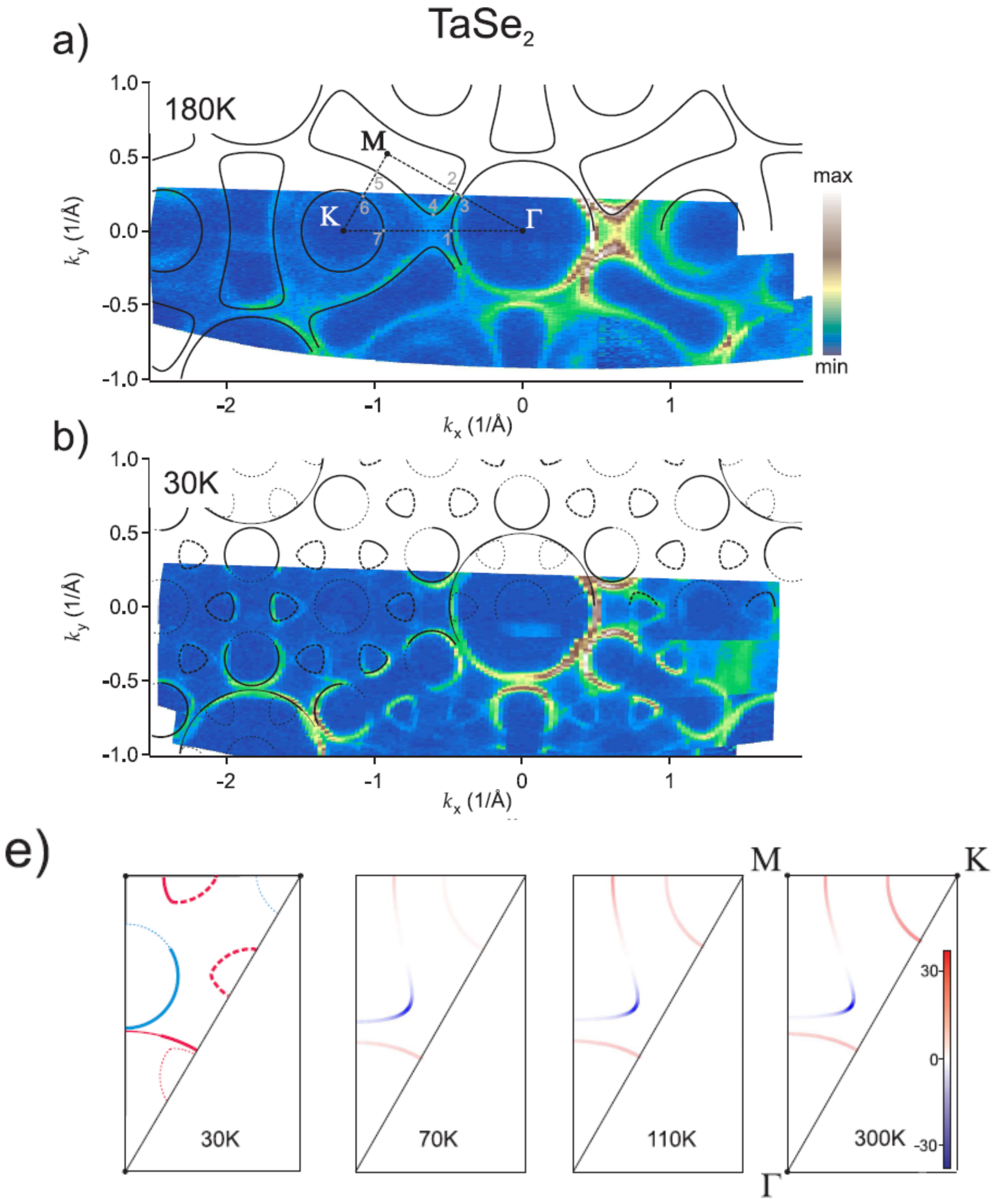
$$R_H = \frac{4\pi^2 L_c}{e} \frac{\int D(\mathbf{k}) v_F^2(\mathbf{k})/\rho(\mathbf{k}) dk}{(\int D(\mathbf{k}) v_F(\mathbf{k}) dk)^2}$$

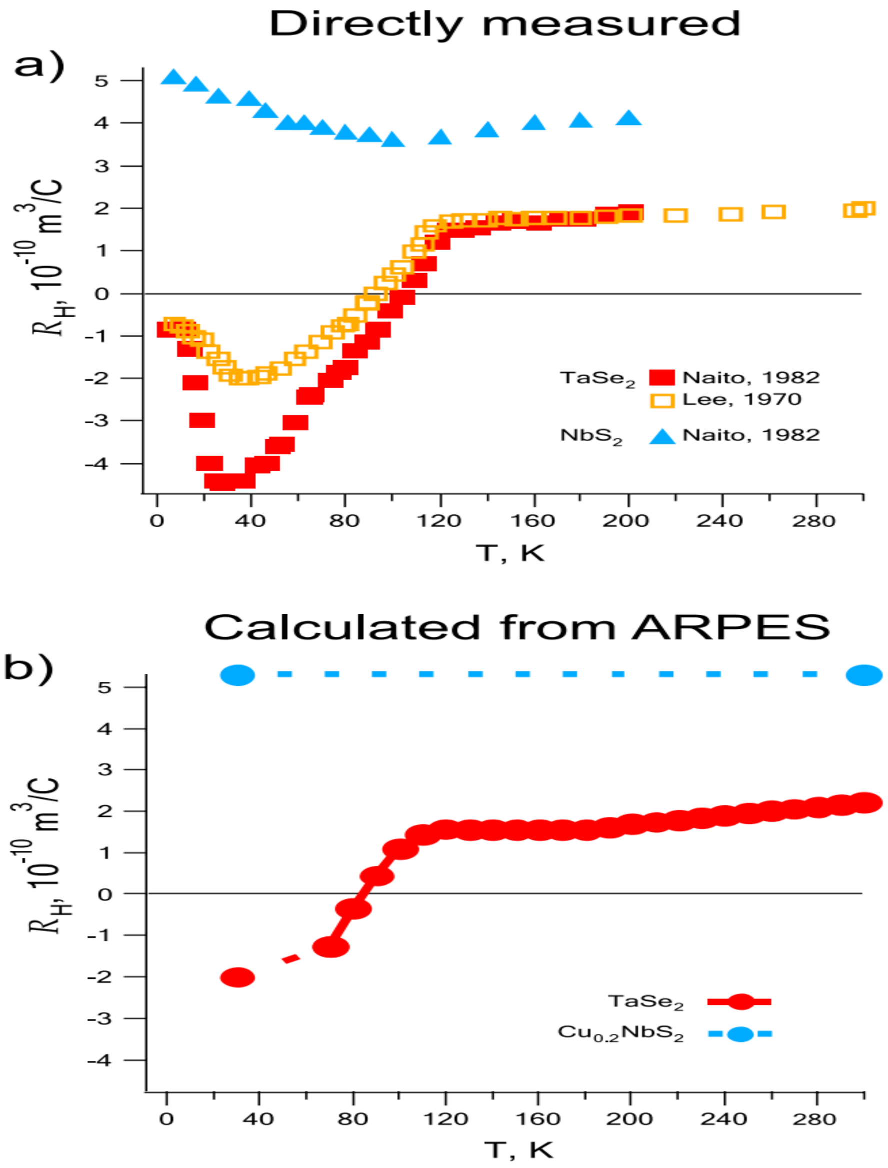
$$\sigma_{xy} = \frac{e^3 B}{L_c h^2} \int \frac{\tau^2(\mathbf{k}) v_{\mathrm{F}}^2(\mathbf{k})}{\rho(\mathbf{k})}\, \mathrm{d}k$$

$$D(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{DOS}_{\mathbf{k}}(\omega) \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) d\omega$$

where τ is quasiparticle lifetime, v_{F} —*renormalized* Fermi velocity, ρ — Fermi surface curvature radius, $\mathrm{d}k$ — element of Fermi surface length, L_c — size of elementary cell along the c axis, h — Plank's constant, e — elementary charge.

D. Evtushinsky *PRL* 2008





D. Evtushinsky *PRL* 2008