7. Experimentell bestämning av Fermi-ytan

En metod för direkt bestämning av formen på Fermiytan är att utnyttja den s.k. de Haas - van Alphen effekten, vilken är benämningen på det faktum att magnetiseringen i vissa metaller är en oskillerande funktion av det magnetiska fällets styrka vid låga temperaturer och stor fältstyrka. Förändringen i fältstyrkans inversa värde över en full oskillation är omvänt proportionell mot ett extremalt snitt A_e genom Fermiytan vinkelrätt mot magnetfällets riktning:

$$\Delta(\frac{1}{H}) = \frac{2\pi e}{\hbar c}\frac{1}{A_e}$$

Genom att variera det pålagda magnetfällets riktning kan Fermiytan kartläggas.

Härledningen av de Haas - van Alphen effekten kan genomföras fullständigt bara för den fria kvantmekaniska elektrongasen, men blir besvärlig då elektronernas och jonernas växelverkning tas i beaktande.

Energin för en klassisk elektron i ett konstant magnetiskt fält i z-riktningen är

$$\epsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

Här är m elektronmassan (m_e).

Schrödingerekvationen för motsvarande kvantmekaniska elektron är

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\vec{A})\psi = \epsilon\psi.$$

För ett konstant fält kan vektorpotentialen $\vec{A}$ uttryckas med hjälp av fältet som

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{H} \times \vec{r}.$$

Då

$$\vec{H} = H\hat{k}$$

blir

$$\vec{A} = \frac{1}{2}H(x\vec{j} - y\vec{i}).$$

Då det alltid är möjligt att addera gradienten av en godtycktig skalärfunktion till $\vec{A}$ kan $\vec{A}$ väljas som

$$\begin{aligned}\vec{A} \to \vec{A}' &= \frac{1}{2}H(x\vec{j} - y\vec{i}) + \nabla(\frac{H}{2}xy) \\ &= Hx\vec{j}.\end{aligned}$$

Schrödingerekvationen blir då

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2m}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{c}Hx)^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \epsilon\psi$$

En lösningsansats är

$$\psi = e^{ik_y + ik_z z}u(x)$$

Insättning leder till

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{e^2H^2}{2mc^2}(x + \frac{\hbar c}{qH}k_y)^2 u = [\epsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}]u$$

Detta är Schrödingerekvationen för en en-dimensionell harmonisk oskillator med centrum i punkten

$$x_0 = -\frac{\hbar c}{qH}k_y$$

Vinkelfrekvensen för oskillatorn blir

$$\frac{1}{2}m\omega^2 = \frac{1}{2m}\frac{e^2H^2}{c^2};$$

$$\omega = \frac{eH}{mc}.$$

Detta uttryck överensstämmer med det klassiska uttrycket för vinkelhastigheten i elektronens spiralrörelse i fältet:

$$\frac{mv^2}{R} = \frac{e}{c}vH \rightarrow \omega = \frac{eH}{mc}.$$

Energin för en 1-dimensionell kvantmekanisk harmonisk oskillator är $(n + 1/2)\hbar\omega$, varav följer att elektronens energi är

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, ...$$

Antalet tillstånd med energikvanttalen (n, k_z) är mycket stort. Degenerationsfaktorn kan beräknas på följande sätt.

Periodiska randvillkor:

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x;\ n_x = 0, \pm 1, ...$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L}n_y;\ n_y = 0, \pm 1, ...$$

Tillståndstätheten i (k_x, k_y)-planet är $(\frac{2\pi}{L})^{-2}$.

Alla tillstånd inom cirkeln $|\vec{k}| = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}\omega}$ har energin $\epsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega$

$$\rightarrow 0 < |\vec{k}| < \sqrt{\frac{2m}{\hbar}\omega} \rightarrow \epsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\rightarrow \sqrt{\frac{2m}{\hbar}\omega} < |\vec{k}| < \sqrt{\frac{2m}{\hbar}2\omega} \rightarrow \epsilon = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar}n\hbar\omega} < |\vec{k}| < \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(n+1)\omega} \rightarrow \epsilon = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$$

Antalet tillstånd inom ringen

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar}n\omega} < |\vec{k}| < \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(n+1)\omega}$$

är

$$\pi\{\frac{2m}{\hbar^2}(n+1)\hbar\omega - \frac{2m}{\hbar^2}(n\hbar\omega)\}(\frac{L}{2\pi})^2$$

$$= \frac{mL^2\omega}{2\pi\hbar}$$

Detta bör multipliceras med 2 då det finns två elektroner per tillstånd. Om $L \sim 1\ cm$ och $H \sim 1\ kG$ blir degenerationstalet $\sim 10^{10}$. Kvanttillstånden (n, k_z) kallas Landau-tillstånd.

Degenerationsfaktorn för oskillatorvinåen (n, k_z) är därigenom

$$\frac{2m\omega}{2\pi\hbar}L^2 = \frac{2eH}{2\pi\hbar}L^2$$

I närheten av Fermienergin är

$$\varepsilon_F \sim n\hbar\omega_c,$$

vilket innebär att kvanttalet n är av storleksordningen

$$n \sim \frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} = \frac{\varepsilon_F}{\frac{e\hbar}{mc}H}$$

Vidare är

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 5.8 \cdot 10^{-5} eV/T$$

Detta innebär att

$$n \sim \frac{\varepsilon_F}{1.16 \cdot 10^{-8} eV/G} \cdot \frac{1}{H}$$

Då $\varepsilon_F \sim eV$ blir $n \sim 10^4$ för magnetfält av normal laboratoriestyrka ($< 10kG$).

Enligt Bohr's korrespondensprincip, som gäller för tillstånd med stora kvanttal, är skillnaden i energi mellan två nivåer h ggr motsvarande klassiska frekvens:

$$\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \frac{h}{T[\varepsilon_n(k_z), k_z]}$$

Det klassiska energiuttrycket är

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m\vec{v}^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k^2}{m}.$$

Arean av cirkelbanan i $\vec{k}$ rymden är

$$A = \pi k^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \varepsilon.$$

Perioden är

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi mc}{eH}.$$

Ett allmänt resultat för semiklassisk rörelse i magnetiska fält ger sambandet mellan T, A och ε som

$$T = \frac{\hbar^2 c}{eH} \frac{\partial A}{\partial \varepsilon}.$$

Detta gäller uppenbart för rörelse längs circelbanor som ovan. Insättning i korrespondensprincipen leder till

$$(\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n) \frac{\partial A}{\partial \varepsilon} = \frac{2\pi eH}{\hbar c}.$$

$$\approx (\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n) \frac{A(\varepsilon_{n+1}) - A(\varepsilon_n)}{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}.$$

Detta leder till

$$A(\varepsilon_{n+1}) - A(\varepsilon_n) \approx \frac{2\pi eH}{\hbar c}.$$

Närmast intill varandra liggande klassiska banor omskriver areor, vars skillnad är konstant:

$$\Delta A = \frac{2\pi eH}{\hbar c}.$$

Detta resultat kan också uttryckas i formen

$$A(\varepsilon_n(k_z), k_z) = (n + \lambda)\Delta A,$$

där λ är oberoende av n.

För ett givet värde på n bildar de banor som satisfierar villkoret

$$A(\varepsilon_n(k_z), k_z) = (n + \lambda)\Delta A$$

ytor med konstant tvärsnitt i k_x, k_y planet:

Antalet banor som bidrar till energitillståndsmängden i intervallet $d\varepsilon$ är $g((\varepsilon)d\varepsilon$, och är proportionellt mot arean av det ”rörelement” som begränsas av tvärsnitten vid ε och $\varepsilon + d\varepsilon$:

Ifall energiytan $\varepsilon(\vec{k})$ tangerar ”Landauröret” kommer de två rörsegmenten att sammanfalla till ett enda stort segment. I detta fall är $\varepsilon(\vec{k})$ en extremalyta och $g(\varepsilon)d\varepsilon$ har ett mycket stort värde. Då de flesta metalliska egenskaper avhänger av energinivåtätheten vid Fermiytan, kommer de att ha en pik då

$$(n+\lambda)\Delta A = A_e(\varepsilon_f),$$

dvs då A_e är ett extremalt tvärsnitt genom Fermiytan. Av

$$\Delta A = \frac{2\pi e H}{\hbar c},$$

följer då att $g(\varepsilon_f)$ har en pik för de H-värden, vars inversa värden åtskiljs av intervallerna

$$\Delta(\frac{1}{H}) = \frac{2\pi e}{\hbar c}\frac{1}{A_e(\varepsilon_f)}.$$

Detta oskillerande beteende försvinner vid temperaturer för vilka Ferminivåns dispersion $k_B T$ är större än energiintervallet mellan Landaunivåerna. För den fria elektrongasen gäller

$$\hbar\omega = \frac{e\hbar}{mc}H$$

så att

$$\frac{\hbar\omega}{k_B T} = \frac{e\hbar}{mck_B}\frac{H}{T} = 1.34\cdot 10^{-4}(\frac{H/G}{T/K}).$$

Detta innebär att förhållandet H/T bör vara större än $10^4 G/K$ för empirisk iakttagelse av de Haas - van Alphen -oskillationerna.

Sambandet mellan cyklotronfrekvensen och banarean

Ifall en elektron rör sig på en sluten konstant-energiyta kommer des vågvektor att beskriva periodisk rörelse. Trajektorien bildas av skärningen mellan konstantenergiytan och ett normalplan till det pålagda magnetiska fältet.

Betrakta två slutna trajektorier med energierna E och $E + \Delta E$:

Den klassiska rörelseekvationen för elektronen är

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{e}{c}\vec{v} \times \vec{H}.$$

Rörelsemängden kan omskrivas som $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, där $\vec{k}$ är vågvektorn. Hastigheten beskrivs av grupphastigheten för ett elektronvågpaket

$$\vec{v}_g = \frac{dE}{d\vec{p}} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\vec{k}}.$$

Insättning i rörelsekvationen leder till

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

Då energiderivatan $\nabla_{\vec{k}}E$ är normal til trajektorien fås

$$\hbar\frac{dk}{dt} = \frac{e}{\hbar c}\frac{dE}{dk}H \approx \frac{e}{\hbar c}\frac{\Delta E}{\Delta k}H$$

Multiplikation med $dt\Delta h$ leder till

$$\Delta k\, dk = \frac{e}{\hbar^2 c}\Delta E\, dt$$

Integration över dt ger

$$\int dt = T = \frac{2\pi}{\omega_c},$$

där ω_c är ”cyclotronfrekvensen”.

Integration över $\Delta k\, dk$ leder till arean ΔA mellan trajektorierna så att

$$\Delta A = \frac{eH}{\hbar^2 c} T \Delta E,$$

varav

$$T = \frac{\hbar^2 c}{eH} (\frac{\partial A}{\partial E}).$$