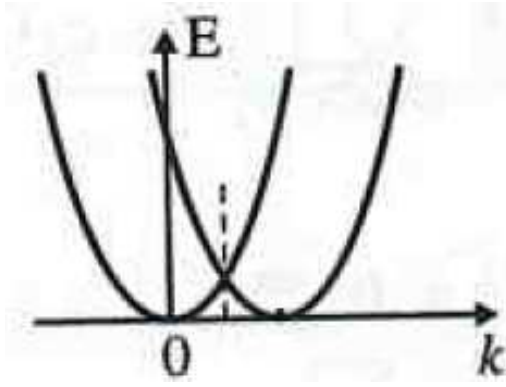
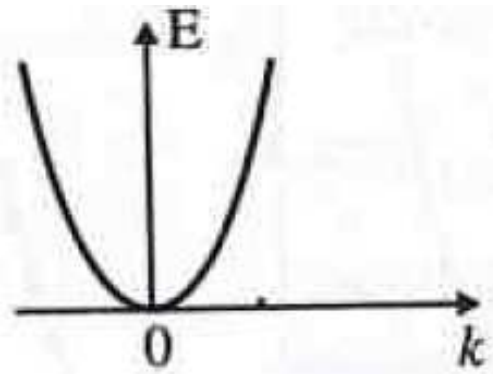
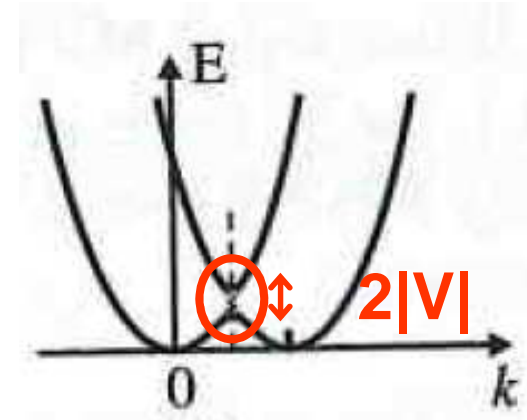


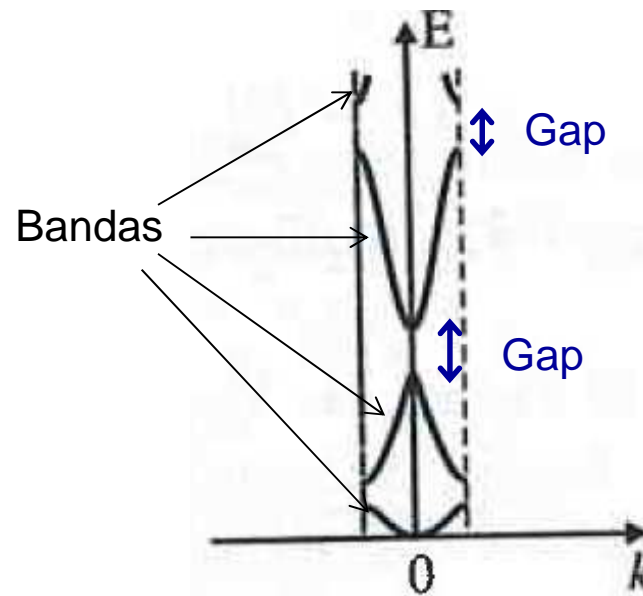
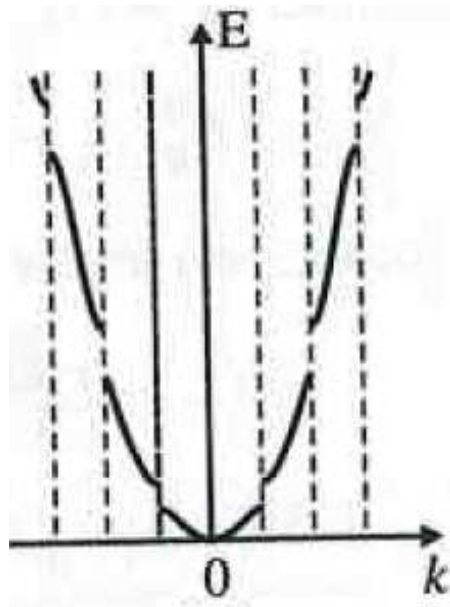
# Elétrons quase livres: gaps nas bandas



$$|\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_2^{(0)}| \ll |V|$$



$$E = \frac{1}{2}(\varepsilon_1^{(0)} + \varepsilon_2^{(0)}) \pm |V|$$



# Onde ocorrem os gaps?

$$\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{G}_n}^{(0)} \rightarrow \varepsilon_n^{(0)}$$

$$\mathbf{G} \equiv \mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_1$$

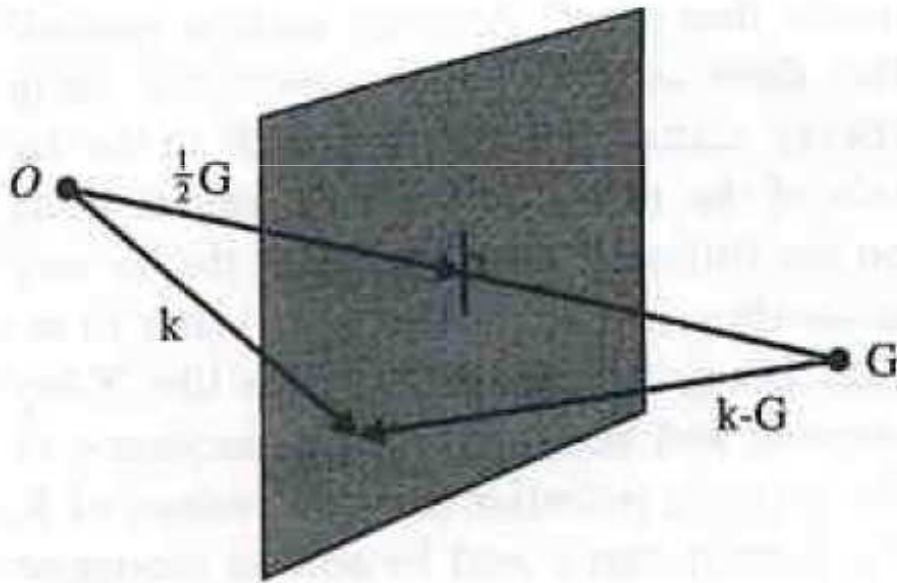
Pontos de degenerescência:

$$|\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{(0)}| \ll |V|$$

$$V_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} = (V_{\mathbf{G}_1-\mathbf{G}_2})^* \rightarrow V$$

$$\mathbf{k} \equiv \mathbf{q} - \mathbf{G}_1$$

$$|\mathbf{k}| \approx |\mathbf{k} - \mathbf{G}|$$



Planos de Bragg:

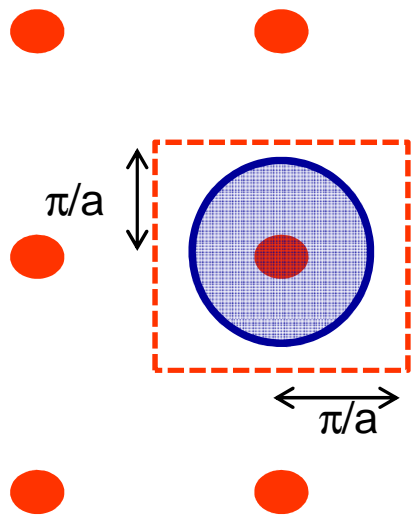
$$\mathbf{G} \cdot \left( \mathbf{k} - \frac{1}{2} \mathbf{G} \right) = 0$$

$$G^2 = 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}$$

Bordas das zonas de Brillouin  
são planos de Bragg

Fig. 3.2 The plane defining the points at which  $E_{\mathbf{k}}^0 = E_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^0$ .

# Exemplo 1: rede quadrada com 1e por sítio.



Elétrons livres em 2D: ( $k_F(n)$  ??? Tarefa de hoje)

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

$$1 \text{ e- por sítio: } n=1/a^2 \quad k_F = \frac{\sqrt{2\pi}}{a} \approx \frac{2.5}{a} < \frac{\pi}{a}$$

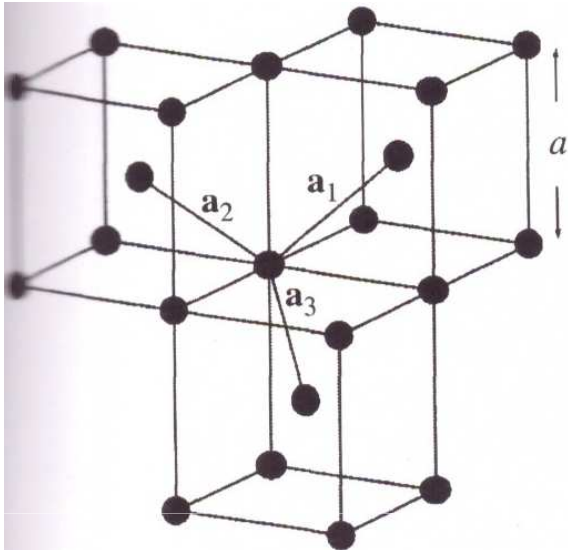
Logo, a superfície de Fermi “cabe” dentro da 1ª ZB.

Primeira banda é parcialmente preenchida.

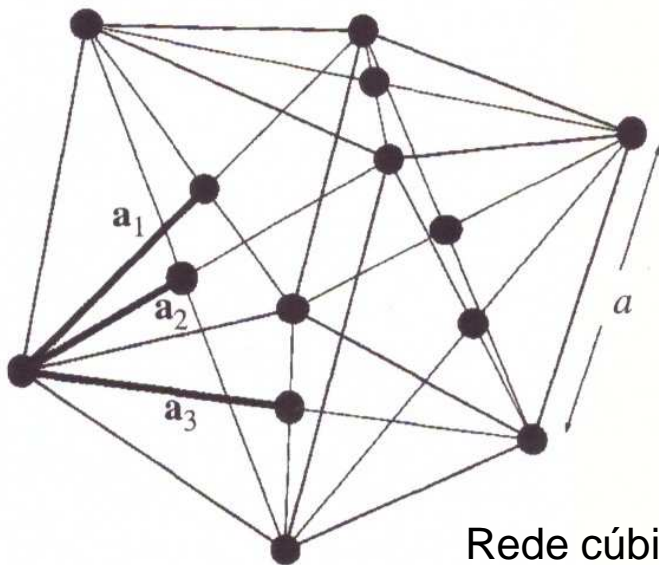
Efeito de um potencial fraco praticamente não é sentido pelos elétrons!

Modelo livre funciona bem.

# Metais alcalinos.



Rede cúbica bcc



Rede cúbica fcc

- Metais alcalinos (Na, K, etc. ) tem um elétron/átomo.
- Estrutura cristalina é cúbica de corpo centrado (bcc).
- Em uma célula cúbica (não unitária) de lado  $a$ , temos dois átomos. Logo:  $n=2/a^3$

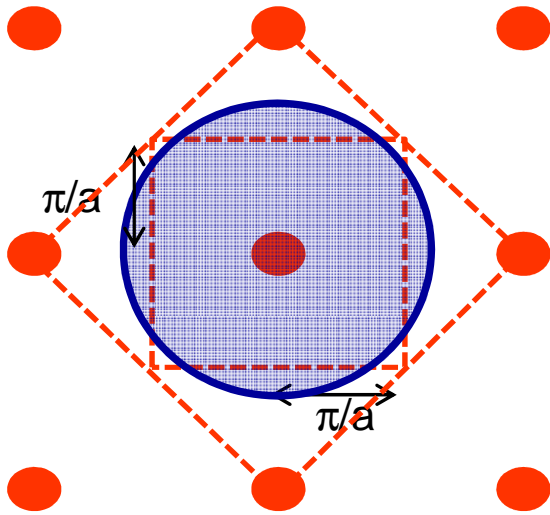
$$3D: \quad k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \Rightarrow k_F \approx 1.24 \frac{\pi}{a}$$

- A rede recíproca é cúbica de face centrada (fcc).
- A menor distância à borda da 1a ZB é (Lista 2):

$$\frac{1}{2} |\mathbf{A}_j| = \sqrt{2} \frac{\pi}{a} > k_F$$

- Superfície de Fermi não encontra a borda da 1a ZB: o modelo livre funciona bem.

# Exemplo 2: rede quadrada com 2e por sítio.



Elétrons livres em 2D:  $k_F = \sqrt{2\pi n}$

$$2 \text{ e- por sítio: } n=2/a^2 \quad k_F = \frac{\sqrt{4\pi}}{a} \approx \frac{3.54}{a} > \frac{\pi}{a}$$

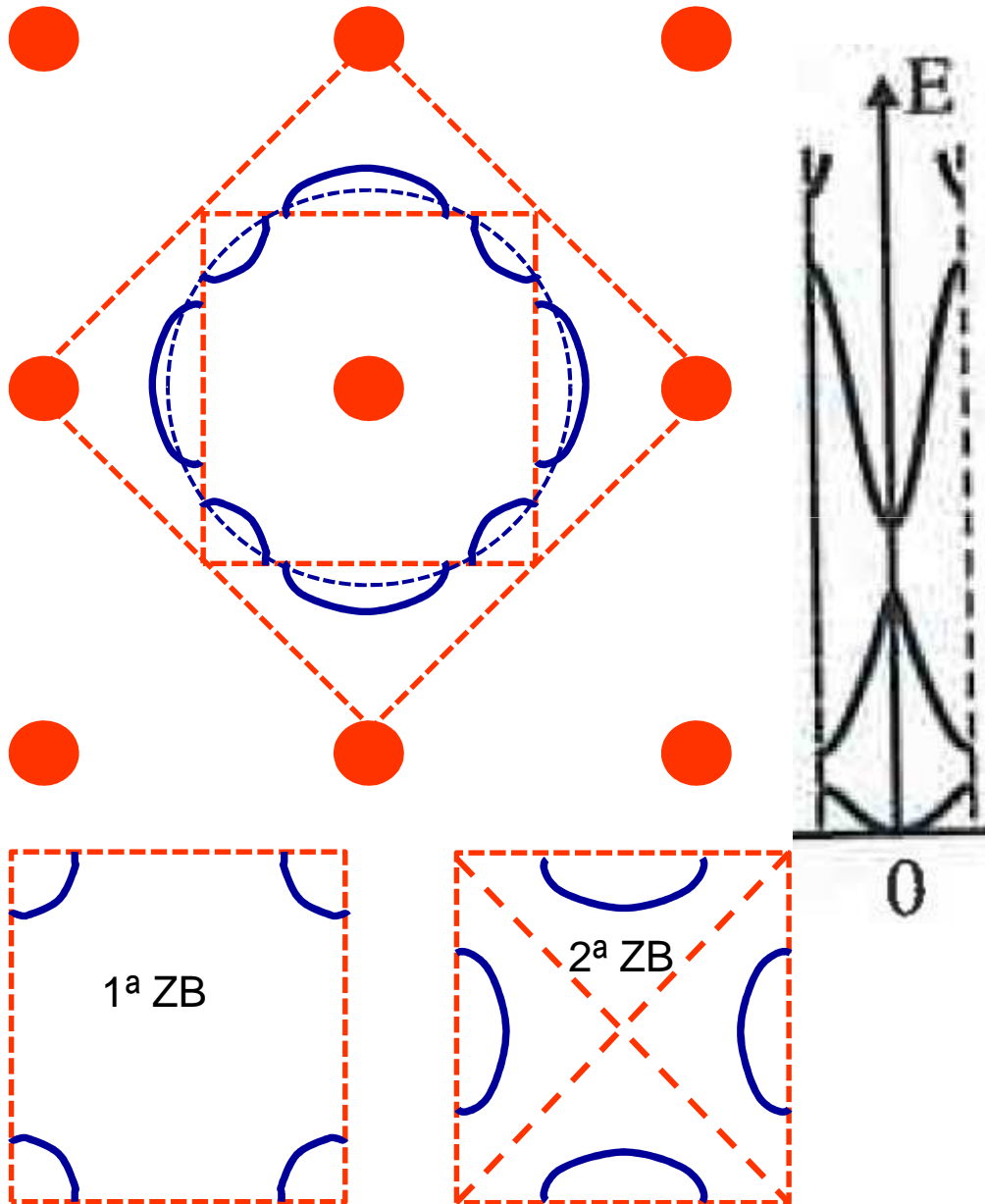
Logo, a superfície de Fermi “vaza” para a 2ª ZB.

Primeira banda é completamente preenchida.  
Segunda banda é parcialmente preenchida.

Ainda é um metal MAS:

**Superfície de Fermi é deformada nas bordas da 1ª ZB.**

# Deformação da superfície de Fermi.

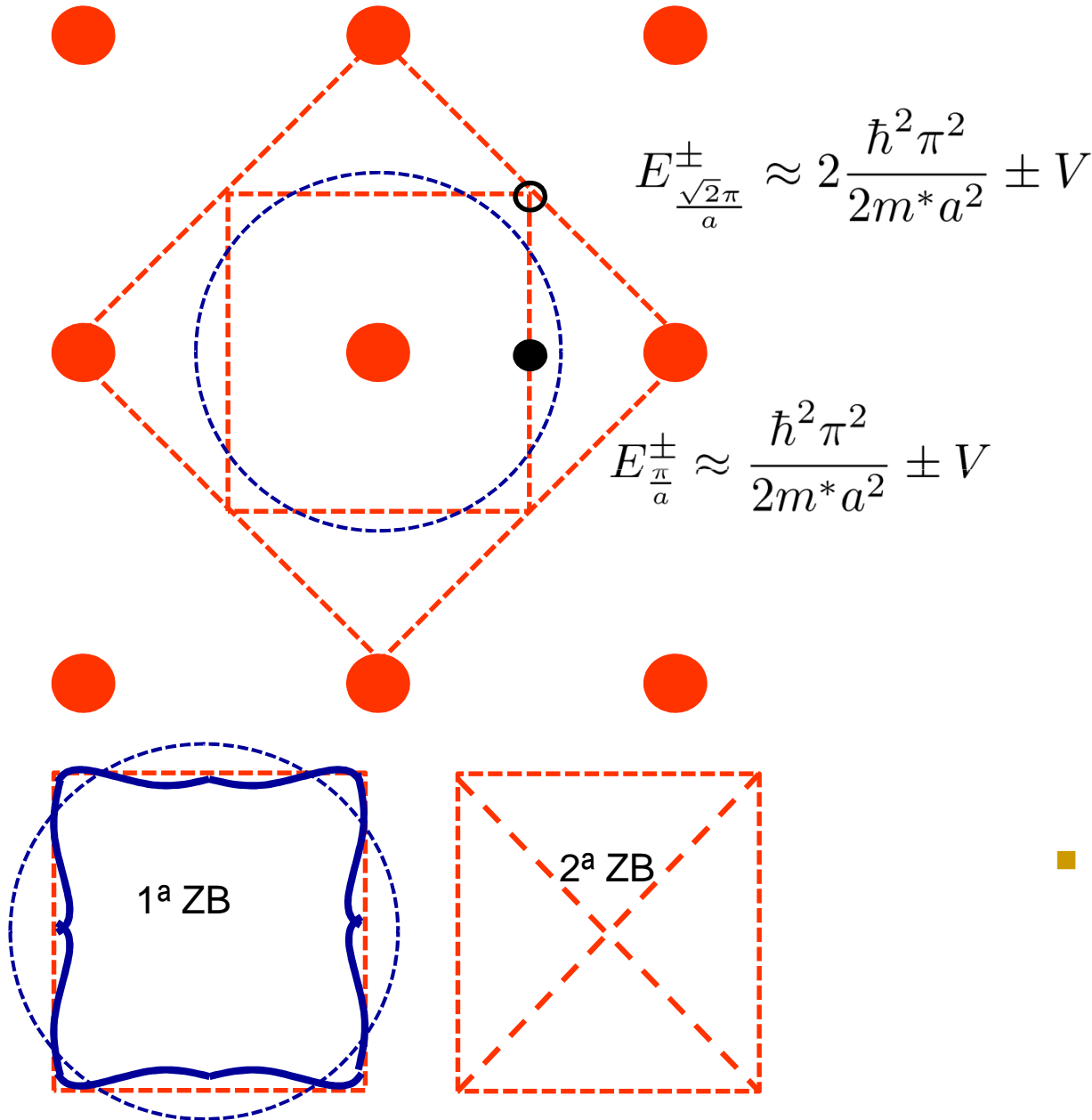


- Visualizando no esquema de “zona reduzida”
- Superfície inclui pontos na 2ª ZB.
- O efeito do gap faz com que a superfície de Fermi intersecte as bordas das zonas perpendicularmente.

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \Big|_{k=k_F} = 0$$

- Isso “suaviza” as curvas nas bordas das ZBs.
- O volume da superfície de Fermi se mantém.

# Em que situação teremos isolantes?



- $V$  pequeno: sempre um condutor pois:

$$E_{\frac{\pi}{a}}^{+} < E_{\frac{\sqrt{2}\pi}{a}}^{-}$$

Logo, a 2ª banda vai ser semi-preenchida.

- Mas e se  $V \gtrsim \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}$  ?

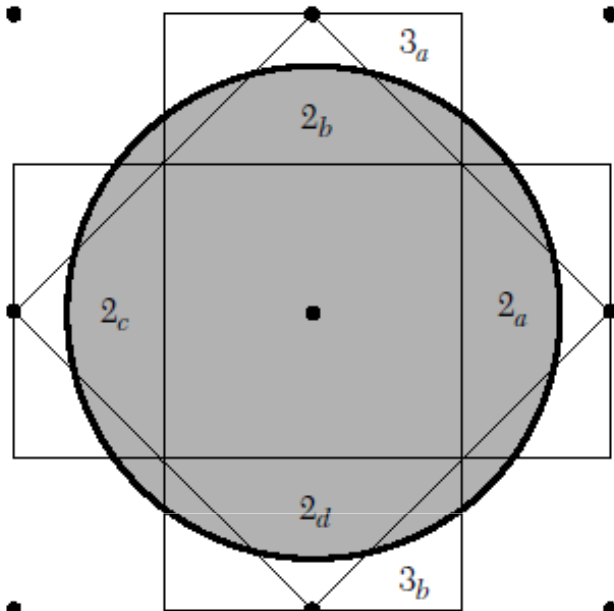
Neste caso, teremos:

$$E_{\frac{\pi}{a}}^{+} > E_{\frac{\sqrt{2}\pi}{a}}^{-}$$

e a 2ª banda não será preenchida!

- Neste caso, todos os elétrons estarão na 1ª banda (totalmente preenchida) e haverá um custo energético para ocupar a 2ª banda.

# Exemplo 3: rede quadrada com 4e por átomo.

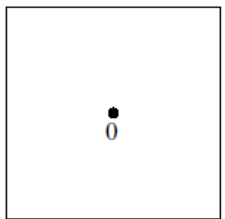


Elétrons livres em 2D:  $k_F = \sqrt{2\pi n}$

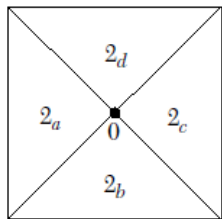
4 e- por átomo:  $n=4/a^2$   $k_F = \frac{\sqrt{8\pi}}{a} \approx \frac{5}{a}$

$$\frac{\sqrt{2}\pi}{a} < k_F < \frac{2\pi}{a}$$

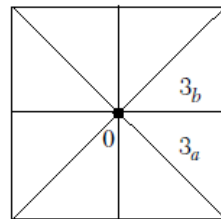
Superfície de Fermi “vaza” para a 3ª ZB.



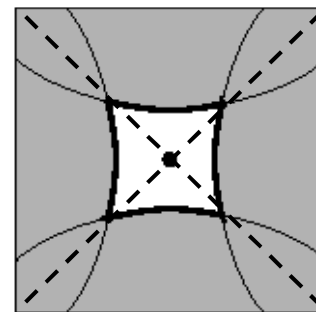
1st zone



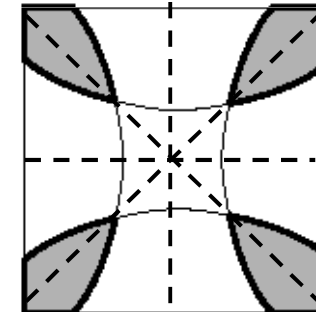
2nd zone



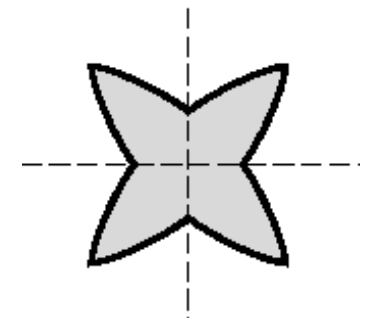
3rd zone



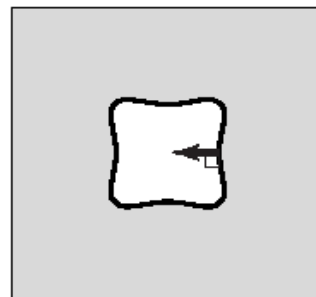
2nd zone



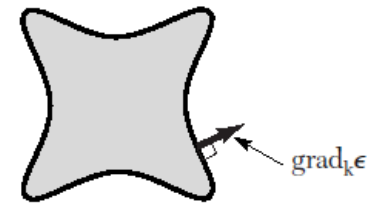
3rd zone



**Efeito do potencial é “arredondar”  
a superfície de Fermi.**



2nd zone



3rd zone