

Fermi-yltor

Fördjupningsarbete

Anders Rehult och Marian Brännvall

Version 0.4

Status

Granskad	PL	18-05-25
Godkänd		

Sammanfattning

Fermi-yltor är viktiga teoretiska verktyg för att förstå elektroners beteenden i fasta material. Dessa ytor kan tas fram genom kvantmekaniska beräkningar och möjliggör en djupare förståelse av materialens elektriska egenskaper. Detta fördjupningsarbete ämnar svara på frågorna “*vad är Fermi-yltor?*” och “*hur kan dessa beräknas numeriskt?*”. Detta görs rent kvalitativt genom en introduktion till de koncept inom fasta tillståndets fysik som ligger till grund för de beräkningar som beskrivs i arbetets andra hälft. Vägen från Schrödingerekvation till Fermi-yta stegas sedan, med mellanleden bandstruktur och tillståndstäthet.

PROJEKTIDENTITET

2018/VT,
Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Kontaktperson hos kund: Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se

Kursansvarig: Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se

Handledare: Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-03-20	Första utkast.	PL, DOK	DOK
0.2	2018-03-27	Andra utkast.	PL, DOK	DOK
0.3	2018-05-07	Tredje utkast.	PL, DOK	DOK
0.4	2018-05-25	Fjärde utkast.	PL, DOK	PL

Innehåll

Dokumenthistorik	iv
1 Inledning	1
2 Syfte	1
3 Förberedande teori	1
3.1 Bakgrund	1
3.2 Kristallstruktur	2
3.2.1 Terminologi	2
3.2.2 Olika typer av Bravais-gitter med kubisk symmetri	3
3.3 Fermi-energi	7
3.4 Bandstruktur	7
3.5 Fermi-yta	8
3.6 Brillouin-zon	8
3.7 Tillståndstäthet	9
4 Numeriska metoder för beräkning av Fermi-yltor (utkast)	10
4.1 Approximativ lösning av Schrödingerekvationen	10
4.2 Bandstrukturberäkning	10
4.3 Tillståndstäthetsberäkning	11
4.4 Fermi-yteberäkning	11

1 Inledning

De stora upptäckterna inom fysik under 1800-talet skedde inom de makroskopiska disciplinerna så som termodynamik och elektromagnetism. Under 1900-talet kom förståelsen för de mikroskopiska disciplinerna att revolutioneras bland annat tack vare upptäckten av röntgenstrålar och radioaktivitet [1]. Under detta århundrade började även den teoretiska grunden till kvantmekaniken att utvecklas av bland annat Erwin Schrödinger och Werner Heisenberg, som en fortsättning på arbete utfört av bland annat Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr och Louis de Broglie.

Frågor kring hur temperatur påverkar elektrisk och termisk konduktivitet hos metaller och legeringar, typiska ingenjörspåslag, kom att bli intressanta även inom den akademiska fysiken eftersom de blev viktiga för teorier kring elektroner [1].

Det som kom att bli det fasta tillståndets fysik var till en början ett splittrat forskningsområde. Först med kvantmekaniken kunde beskrivningar av olika egenskaper hos fasta ämnen förenas, men även efter detta dröjde det innan det fasta tillståndets fysik blev en självständig disciplin [1].

Bandstrukturteorin var en av de tidiga framgångarna från insikten under 1920-talet att man, med kvantmekanikens hjälp, kunde förstå elektroners beteende i fasta ämnen. Teorin utvecklades främst av Felix Bloch, som också har namngett flera koncept inom bandstrukturteorin såsom Bloch-vågor. Förståelsen av elektronernas beteenden bidrog till förståelsen av skillnaden mellan metaller och isolatorer. Båda innehåller elektroner som nästan är fria men i isolatorer är elektronernas energinivåer grupperade i helt fyllda band (se kapitel 3.4), och material med denna egenskap leder inte ström. Ett fast ämne med delvis fyllda band leder däremot ström och dessa har en Fermi-yta. Fermi-ytor är viktiga för att förstå metaller och deras elektriska egenskaper. Vikten av Fermi-ytor blir särskilt tydlig med fysikern Allan Mackintoshs påstående att definitionen av metaller som "fasta material med en Fermi-yta" kan vara den mest meningsfulla definitionen av metaller som kan ges [2].

2 Syfte

Syftet med detta arbete är att svara på dessa frågor: Vad är Fermi-ytor och hur kan dessa beräknas numeriskt?

3 Förberedande teori

I detta kapitel förklaras några av de termer och koncept som behövs för att förstå de beräkningsmetoder som behandlas i kapitel 4.

3.1 Bakgrund

Fördjupningsarbetet görs som en del av kursen TFYA75, kandidatprojekt i fysik, vid Linköpings universitet. Ett av projekten i denna kurs är ett visualiseringsprojekt. I visualiseringsprojektet för år 2018 ska bland annat Fermi-ytor visualiseras. Denna rapport ämnar bidra till djupare förståelse för dessa ytor.

3.2 Kristallstruktur

En kristall kan modelleras som identiska grupper av atomer i tre dimensioner.

3.2.1 Terminologi

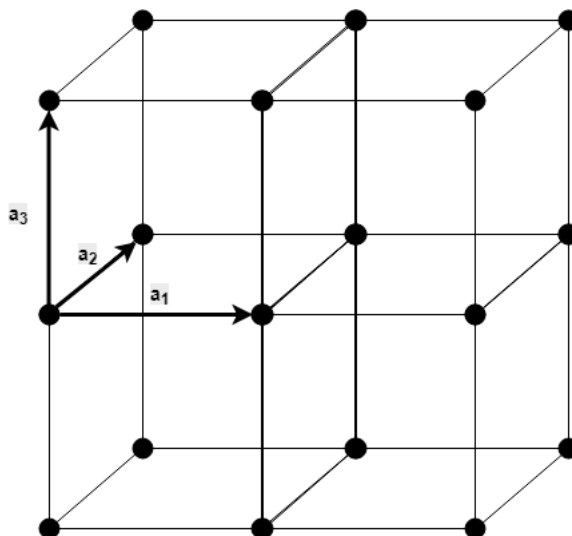
Bas: En ideal kristall är uppbyggd av oändligt upprepade identiska atomgrupper. En sådan atomgrupp kallas bas. En atomgrupp som innehåller minsta möjliga antal atomer kallas för den primitiva basen [3, s. 4].

Gitter: Är den mängd matematiska punkter som basen är kopplad till. Närmare definition av gitter återfinns under beskrivningen av translationsvektorer.

Translationsvektorer: Är de vektorer som gittret kan definieras utifrån. I tre dimensioner kan gittret definieras utifrån translationsvektorer \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 och \mathbf{a}_3 så att atomernas placering i kristallen ser likadana ut från punkt \mathbf{r} som från varje punkt \mathbf{r}' translaterad med en heltalsmultipel av translationsvektorer, vilket beskrivs av sambandet (1).

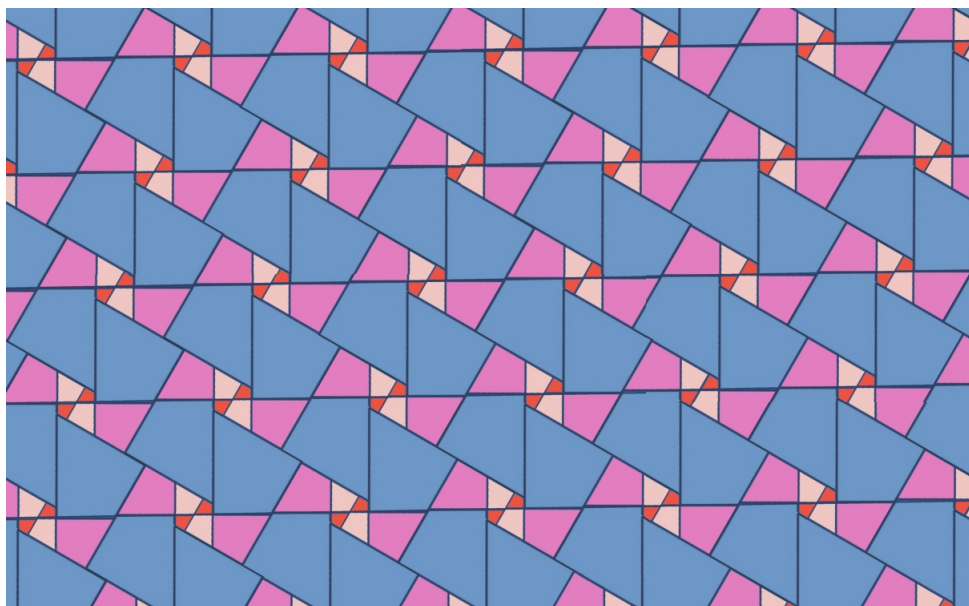
$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3 \quad (1)$$

Där u_1 , u_2 och u_3 alltså är heltal. Mängden av punkter \mathbf{r}' som definieras av (1) för alla u_1 , u_2 , u_3 definierar gittret [3, s. 4]. I figur 1 ses ett exempel på translationsvektorer i ett gitter.



Figur 1: Translationsvektorer i ett rydggitter.

Enhetscell: En enhetscell är en volymsdel av en kristall som genom upprepade duplicering och translation kan fylla hela rummet. Se figur 2 för ett exempel på en enhetscell i två dimensioner som vid upprepning fyller hela rummet.



Figur 2: Representation av en enhetscell (en “rektangel” i bilden) som upprepas för att fylla ut hela bilden. Figur av Shtilman A. [4]

Primitiv cell: Den primitiva cellen är den cell som besittande minsta möjliga volym omsluter den primitiva basen. Den primitiva cellen innehåller endast en gitterpunkt och är en enhetscell.

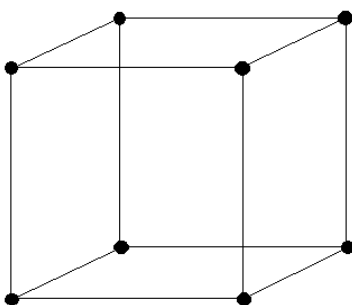
Bravais-gitter: Ett Bravais-gitter är en oändlig mängd diskreta punkter som ser exakt likadan ut oberoende av vilken gitterpunkt den betraktas från [5, s. 64]. När hela rummet fylls av upprepning av en enhetscell fås ett Bravais-gitter. Om mönstret i figur 2 hade upprepats oändligt i alla riktningar så hade alla mängder av punkter i bilden stora nog för att täcka in minst en rektangel varit Bravais-gitter.

Reciproka gitter: Varje Bravais-gitter har en motsvarighet i det reciproka rummet vars form beror av Bravais-gittrets periodicitet. Ett Bravais-gitters reciproka gitter är även det ett reciprokt gitter [5, s. 86].

3.2.2 Olika typer av Bravais-gitter med kubisk symmetri

Det finns tre typer av Bravais-gitter med kubisk symmetri: enkel (eng. simple cubic), ytcentrerad (eng. face-centered cubic) och rymdcentrerad (eng. body-centered cubic).

Enkelt (sc): Detta Bravais-gitter har gitterpunkter i varje hörn av kubens, se figur 3.

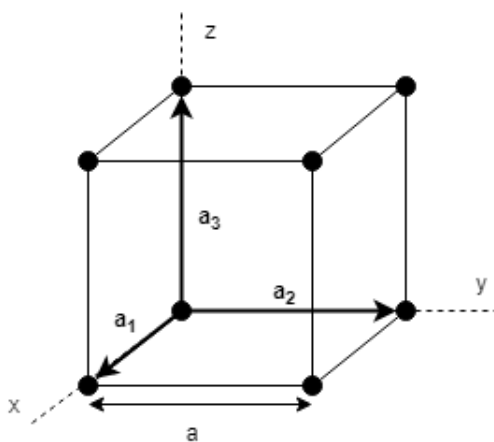


Figur 3: Det kubiska Bravais-gittret, simple-cubic.

Ett enkelt kubiskt Bravais-gitter innehåller en gitterpunkt per cell [3, s. 9-11]. I kartesiska koordinater är ett möjligt val av translationsvektorer för gittret följande:

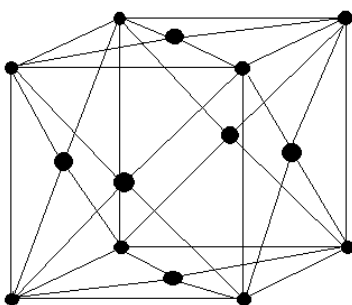
$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}; \mathbf{a}_2 = a\hat{y}; \mathbf{a}_3 = a\hat{z}$$

där a är kubens sidolängd. Detta illustreras i figur 4.



Figur 4: Det kubiska Bravais-gittret, simple-cubic, med translationsvektorer.

Ytcentrerad (fcc): Detta Bravais-gitter har, förutom gitterpunkter i varje hörn, även gitterpunkter i mitten av varje sida på kuben, se figur 5.

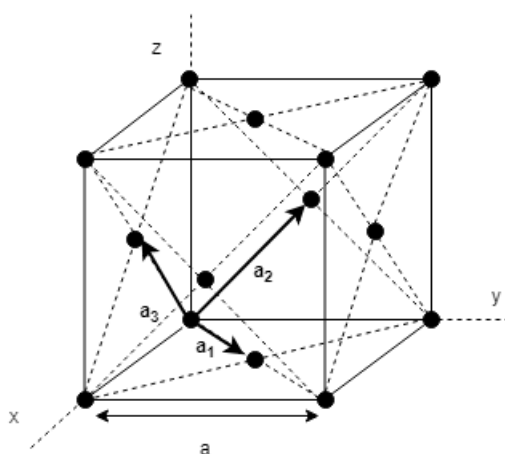


Figur 5: Det kubiska Bravais-gittret, face-centered-cubic.

Det ytcentrerade kubiska Bravais-gittret innehåller fyra gitterpunkter per cell. I kartesiska koordinater är ett möjligt val av translationsvektorer för gittret följande:

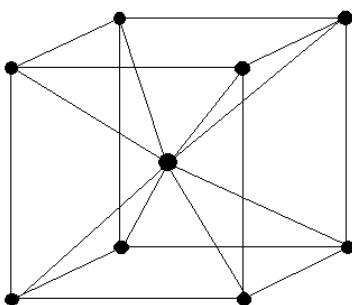
$$\mathbf{a}_1 = 0.5a(\hat{x} + \hat{y}); \mathbf{a}_2 = 0.5a(\hat{y} + \hat{z}); \mathbf{a}_3 = 0.5a(\hat{z} + \hat{x})$$

där a är kubens sidolängd [3]. Detta illustreras i figur 6.



Figur 6: Det kubiska Bravais-gittret, face-centered-cubic, med translationsvektorer.

Rymdcentrerad (bcc): Detta Bravais-gitter har, förutom gitterpunkter i varje hörn, även en gitterpunkt i mitten av kuben, se figur 7.

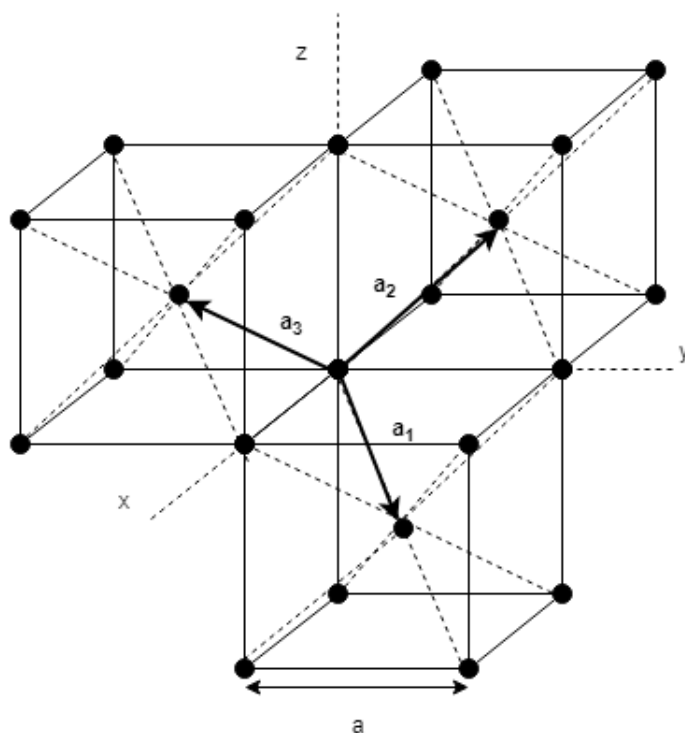


Figur 7: Det kubiska Bravais-gittret, body-centered-cubic.

Det rymdcenterade kubiska Bravais-gittret innehåller två gitterpunkter per cell. I kartesiska koordinater är ett möjligt val av translationsvektorer för gittret följande:

$$\mathbf{a}_1 = 0.5a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}); \mathbf{a}_2 = 0.5a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}); \mathbf{a}_3 = 0.5a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

där a är kubens sidolängd.[3]. Detta illustreras i Figur 8.



Figur 8: Det kubiska Bravais-gittret, body-centered-cubic, med translationsvektorer.

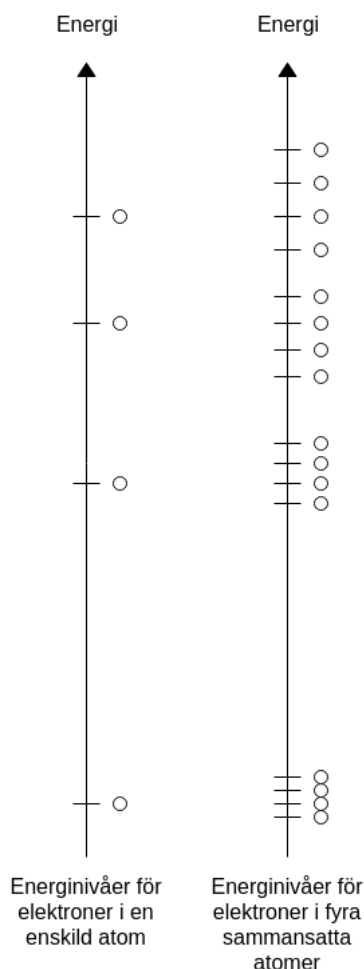
3.3 Fermi-energi

Fermi-energin är en speciell energi för ett flerelektronsystem och kan definieras på flera sätt. Den mest relevanta definitionen för numeriska beräkningar är denna: Fermi-energin är en energi där antalet enelektrontillstånd med energi lägre än Fermi-energin vid temperaturen 0 K är lika med det totala antalet elektroner i systemet [5, s. 141].

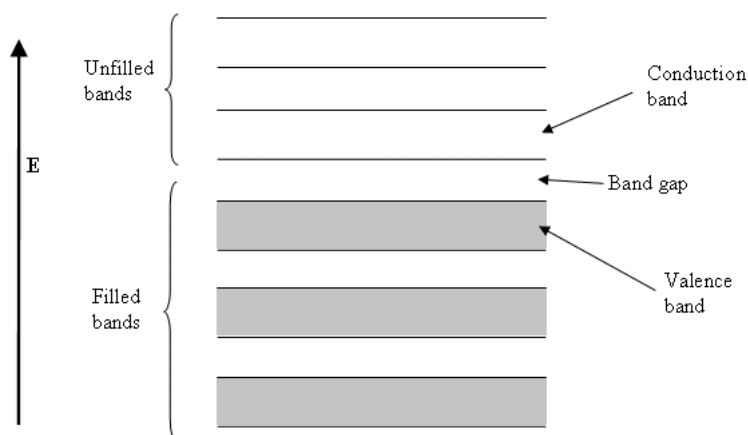
3.4 Bandstruktur

Elektroner i en atom ordnas enligt Pauliprincipen - inga två elektroner kan dela samma värden på alla kvanttal (inklusive spinn). När atomer sätts ihop till molekyler eller kristaller gäller fortfarande principen, så en förändring i besättning fås då elektroner besätter samma orbital [3, s. 56-57]. Detta gör att energin av elektronerna ändras något, se figur 9. Dessa energiändringar är mycket små, vilket orsakar att elektronernas energinivåer i en kristall packas mycket tätt i band i en kristallstruktur, se figur 10 [6, s. 178].

I en kristall beror elektronernas energi av vågtalet, k . Se kapitel 4.2 för hur detta används.



Figur 9: Illustration av hur elektroners energinivåer i en molekyl eller kristall samlas tätt kring energinivåerna hos de enskilda atomerna som utgör molekylen eller kristallen.



Figur 10: Bandstruktur i en halvledare. Figur av Starling T. [7]

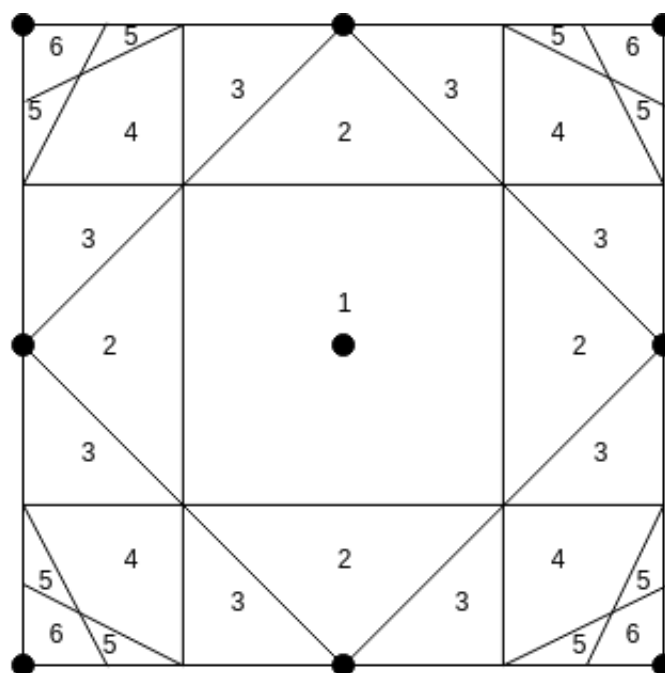
3.5 Fermi-yta

Om ett antal band inte är helt fyllda finns det för varje band en yta i reciproka rummet som separerar fyllda elektronenergitillstånd från ofyllda. Mängden av alla sådana ytor i en kristall är känd som kristallens Fermi-yta, medan delarna av Fermi-ytan som kommer från de individuella banden kallas för grenar till Fermi-ytan [5, s. 142]. Fermi-ytan är alltså i det reciproka rummet en sammansättning av ytor med konstant energi, en isoyta.

3.6 Brillouin-zon

Den 1:a Brillouin-zonen är Wigner-Seitz-cellen av det reciproka gittret, det vill säga mängden av punkter i k -rummet som ligger närmre origo än någon annan reciprokt gitterpunkt [5, s. 73]. Ett Bragg-plan är ett plan som vinkelrätt bisektrerar vektorerna mellan origo och andra reciproka gitterpunkter [5, s. 99], så en ekvivalent definition är denna: Den 1:a Brillouin-zonen är mängden av punkter i k -space som kan nås från origo utan att korsa något Bragg-plan. På samma sätt fortsätter man: Den 2:a Brillouin-zonen är mängden av punkter i k -space som nås när exakt ett Bragg-plan korsas (utan att korsa tillbaka till en redan passerad zon), och så vidare. Se figur 11 för en illustration av detta.

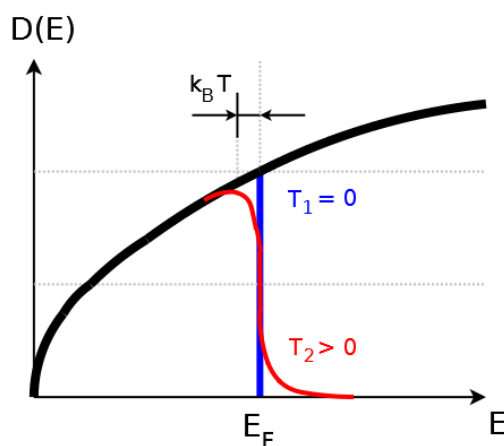
Alla Brillouin-zoner är primitiva celler till det reciproka gittret [5, s. 163]. Eftersom Brillouin-zonerna beror av geometrin hos det gitter som finns så ser samtliga Brillouin-zoner olika ut för olika kristallstrukturer.



Figur 11: Illustration av definitionen av Brillouin-zoner för ett tvådimensionellt Bravais-gitter. Figuren visar gitterpunkter i form av prickar och Bragg-plan som linjer. Siffrorna indikerar de olika Brillouin-zonerna (1:a, 2:a, och så vidare). Figur inspirerad av figur i Solid State Physics av Ashcroft, N. och Mermin, N. [5]

3.7 Tillståndstäthet

Tillståndstätheten beskriver hur många tillstånd som finns för olika energier. I Figur 12 beskrivs tillståndstätheten som funktion av energin i den så kallade Fermi-Dirac-fördelningen [8, s. 374]. Den blå och den röda linjen visar skillnaden i hur tillstånd är ockuperade beroende på temperaturen. När temperaturen är noll Kelvin är inga tillstånd med energi över Fermi-energin ockuperade men ökas temperaturen så kommer vissa elektroner genom termisk excitation kunna ha energier över Fermi-energin.



Figur 12: Teoretisk tillståndstäthet som funktion av energin. Figur av Feidlimid H. [9]

4 Numeriska metoder för beräkning av Fermi-ytor (utkast)

För att beräkna Fermi-ytan hos ett material behövs två saker:

- Förhållandet mellan elektroners energi och vågtal k .
- Fermi-energin.

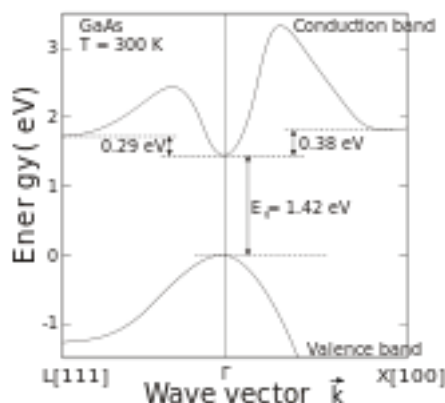
Den första fås genom att gå från Schrödingerekvationen till energiekvationer för de olika banden i bandstrukturen via täthetsfunktionalteori (eng. density functional theory, DFT), se kap. 4.1. Den andra fås genom att börja på samma sätt och sedan sätta in ett antal k -punkter i energiekvationerna för att få ut bandstrukturen (se kap. 4.2), beräkna tillståndstätheten (se kap. 4.3), och till slut integrera tillståndstätheten från negativa oändligheten till Fermi-energin, sätta integralen lika med antalet elektroner i systemet, och sedan lösa ut Fermi-energin.

4.1 Approximativ lösning av Schrödingerekvationen

Schrödingerekvationen som beskriver en partikels position och energi är omöjlig att lösa exakt för komplicerade system. För komplicerade system används därför metoden DFT för att gå från Schrödingerekvationen till energiekvationerna för de olika banden i bandstrukturen.

4.2 Bandstrukturberäkning

Från energiekvationerna för varje band fås energin för k -punkter belägna längs en slinga som täcker viktiga symmetripunkter i 1:a Brillouin-zonen, vilket ger ett förhållande mellan vågtal och energi längs denna slinga. Figur 13 beskriver bandstrukturen för Galliumarsenid (GaAs) som är en halvledare och därmed en icke-metall. Icke-metaller har ett bandgap mellan valensband och ledningsband och det är i detta gap som Fermi-energin ligger.

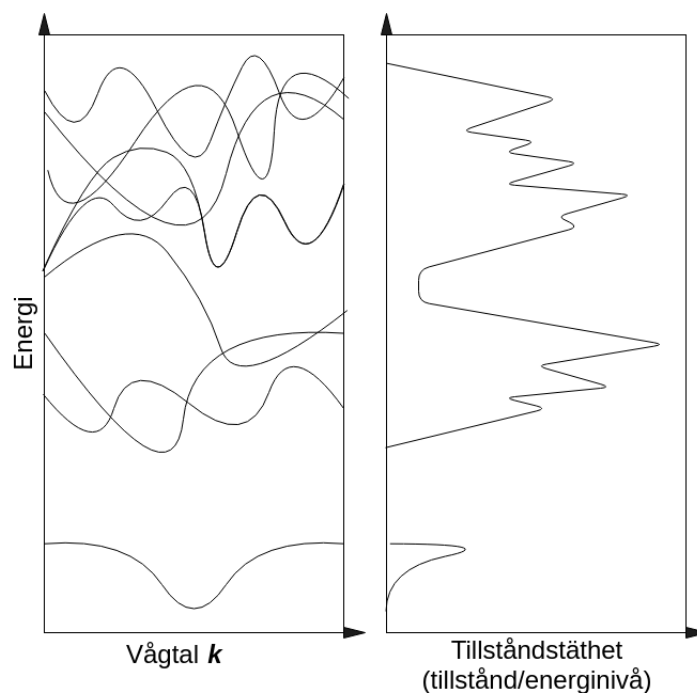


Figur 13: Bandstrukturen för GaAs. Figur av Cepheiden [10].

Att Fermi-energin ligger mitt i bandgapet innebär att inga k -punkter har den energin och en Fermi-yta kan inte fås ut. I metaller kommer ledningsbandet och valensbandet att överlappa och Fermi-energin kommer vara någonstans i överlappet vilket alltså kommer ge en Fermi-yta.

4.3 Tillståndstäthetsberäkning

Tillståndstätheten kan beräknas utifrån bandstrukturen. Detta genom att i bandstrukturplotten gå uppåt längs energi-axeln ett litet steg i taget och räkna antalet gånger som något band korsas vid varje energinivå, det vill säga hur många tillstånd som finns för den energin. I Figur 14 illustreras förhållandet mellan bandstruktur och tillståndstäthet (det är ett påhittat exempel och alltså inte en illustration av ett faktiskt ämnes bandstruktur och tillståndstäthet). I denna bild syns tydligt att i ett bandgap korsas inga band och alltså är tillståndstätheten noll vid dessa energier. I praktiken utgår man inte från en bandstrukturplott, utan istället från den tredimensionella "bandstrukturen" som fås då man beräknar energierna för ett stort antal k -punkter utspridda i den 1:a Brillouin-zonen.

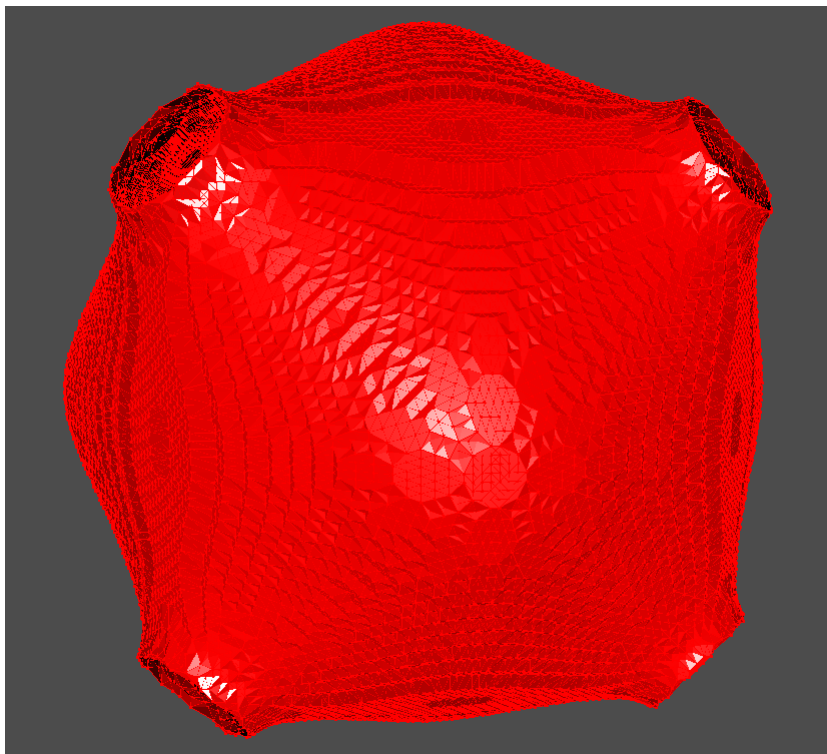


Figur 14: Förhållandet mellan bandstruktur och tillståndstäthet.

Om tillståndstätheten integreras från negativa oändligheten till Fermi-energin så fås antalet elektroner i systemet, se definitionen i kap. 3.3. Antalet elektroner i systemet är känt vilket gör att Fermi-energin kan lösas ut.

4.4 Fermi-yteberäkning

När energiekvationerna för varje band har tagits fram och Fermi-energin har lösts ut kan Fermi-ytan beräknas i form av en energiisoyta i det reciproka rummet med energi lika med den framtagna Fermi-energin (se kapitel 3.5). Figur 15 beskriver Fermi-ytan för silver.



Figur 15: Fermi-yta för silver. Figur av Marmodoro A. [11]

Referenser

- [1] Hoddson L. m. fl. *Out of the Crystal Maze: Chapters from the History of Solid-State Physics*. New York: Oxford University Press, 1992, s. 3–5.
- [2] Stephen Dugdale. “Life on the edge: a beginner’s guide to the Fermi surface”. I: *Physica Scripta* 2016. 91 (53009), s. 1–3.
- [3] Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*. 8th edition. New Jersey: John Wiley & Sons, 2005.
- [4] Shtilman A. 4sizedtile [bild]. 2008 [citerad 2018 April 30].
Hämtad från <https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/35/4sizedtile.jpg>. Public domain, se <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:4sizedtile.jpg>.
- [5] Neil Ashcroft och David Mermin. *Solid State Physics*. 1st edition. California: Cengage Learning, 1976.
- [6] Sharon Ann Holgate. *Understanding Solid State Physics*. 1st edition. Boca Raton, Florida: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009, s. 178.
- [7] Starling T. Semiconductor band structure (lots of bands). [citerad 2018 April 30]
Hämtad från https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/a/a3/Semiconductor_band_structure_%28lots_of_bands%29.png (CC BY-SA 3.0) <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/deed.en>.
- [8] Harris R. *Modern Physics*. 2nd edition. San Francisco: Pearson, 2008.
- [9] Feidlimid H. Electron gas Density of states sketched. 2014 [citerad 2018 April 30].
Hämtad från https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c1/Electron_gas_Density_of_states_sketched.png. (CC BY-SA 4.0) <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.en>.
- [10] Cepheiden (Wikipedia-användare). Bandstruktur GaAs. 2009 [citerad 2018 April 30].
Hämtad från https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/6/67/Bandstruktur_GaAs_en.svg. (CC BY-SA 3.0) <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/deed.en>.
- [11] Marmodoro A. Bulk Ag, Fermi surface. 2012 [citerad 2018 April 30]
Hämtad från https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/b2/Bulk_Ag%2C_Fermi_surface.png. (CC BY-SA 3.0) <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/deed.en>.