

Elétrons em um potencial periódico

①

Vamos agora apresentar uma discussão mais geral acerca da propagação de elétrons em uma rede cristalina. Como no nosso exemplo 1d para o modelo TBH, veremos que o quase momento é conservado e os elétrons propagam-se de forma coerente mesmo em um potencial periódico.

Nosso ponto de partida será o de elétrons livres e buscaremos investigar os efeitos perturbativos do potencial da rede.

- $\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} = \hbar^2 \frac{k^2}{2m}$ (elétrons livres)

Autoestado são ondas planas: $|\vec{k}\rangle$.

- $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(\vec{r})$, $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ (periodicidade da rede)

- $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \int d^3r e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) \equiv V_{\vec{k}' - \vec{k}}$,
vetor da rede \leftarrow

que é diferente de zero apenas se $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$ (2ave)

- Vamos agora aplicar teoria de perturbação à $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(\vec{r})$

- 1ª ordem:

$$E(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + \langle \vec{k} | V | \vec{k} \rangle = \hbar^2 \frac{k^2}{2m} + V_0$$

\Rightarrow apenas um deslocamento constante à energia dos elétrons livres. Contribuição trivial. Por simplicidade, faremos $V_0 = 0$ e redefinimos nossa origem de energia.

• 2ª ordem:

$$E(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + \sum'_{\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}} \frac{|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2}{E_0(\vec{k}) - E_0(\vec{k}')}$$

(2)

Aqui a " ' " na soma quer dizer que $\vec{G} \neq 0$. Para maior parte dos momentos \vec{k} temos apenas uma pequena correção para a dispersão dos elétrons livres. Contudo, se tivermos uma degenerescência o denominador diverge e precisamos empregar teoria de perturbação degenerada. Já antecipamos que nas regiões das dessas pontos é onde teremos as correções mais relevantes:

$$E_0(\vec{k}) = E_0(\vec{k}') \text{ e } \vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \text{ (degenerescência)}$$

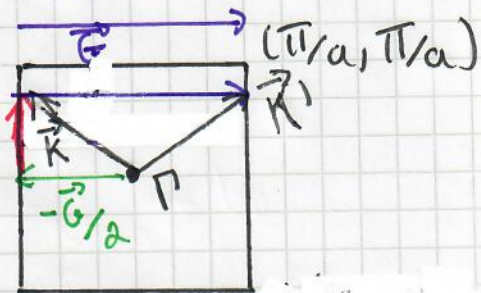
Essas condições são satisfeitas quando \vec{k} e \vec{k}' estão localizados nas fronteiras das zonas de Brillouin. É aí que os efeitos do potencial periódico são mais aparentes:

$$E_0(\vec{k}) = E_0(\vec{k}') \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k})^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2$$

$$k^2 = k^2 + \vec{G} \cdot \vec{G} + 2\vec{k} \cdot \vec{G} \Rightarrow \vec{G} \cdot \vec{G} = -2\vec{k} \cdot \vec{G} \Rightarrow \vec{k}_{\parallel} = -\frac{\vec{G}}{2}$$

onde \vec{k}_{\parallel} quer dizer a componente de \vec{k} // a \vec{G} .

$$\vec{k} = \vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp} = -\frac{\vec{G}}{2} + \vec{k}_{\perp}$$



No exemplo 2d ao lado vemos que \vec{k} e \vec{k}' marcam

em planos (linhas aqui) $(-\pi/a, -\pi/a)$

localizados nas fronteiras da BZ.

Para avaliar os efeitos de $V(\vec{r})$, recorremos à teoria de perturbação degenerada:

Se dois estados de onda plana $|\vec{k}\rangle$ e $|\vec{k}+\vec{G}\rangle$ possuem aproximadamente a mesma energia (ou seja \vec{k} e \vec{k}' estão próximos da fronteira da BZ) podemos escrever a hamiltoniana nesse subespaço degenerado (é um problema análogo ao das ligações covalentes)

$$\cdot \langle \vec{k} | \mathcal{H} | \vec{k} \rangle = \epsilon_0(\vec{k}) \quad \cdot \langle \vec{k}' | \mathcal{H} | \vec{k}' \rangle = \epsilon_0(\vec{k}') = \epsilon_0(\vec{k}+\vec{G})$$

$$\cdot \langle \vec{k} | \mathcal{H} | \vec{k}' \rangle = V_{\vec{k}-\vec{k}'} = V_{\vec{G}}^* \quad \cdot \langle \vec{k}' | \mathcal{H} | \vec{k} \rangle = V_{\vec{k}'-\vec{k}} = V_{\vec{G}},$$

lembrando que $V_{\vec{G}}^* = V_{-\vec{G}}$, pois $V(\vec{r}) \in \mathbb{R}$.

Temos assim que

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_0(\vec{k}) & V_{\vec{G}}^* \\ V_{\vec{G}} & \epsilon_0(\vec{k}+\vec{G}) \end{pmatrix}, \text{ seus autovalores são:}$$

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} [\epsilon_0(\vec{k}) + \epsilon_0(\vec{k}+\vec{G})] \pm \left[\frac{\epsilon_0(\vec{k}) - \epsilon_0(\vec{k}+\vec{G})}{2} + |V_{\vec{G}}|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

Podemos analisar esse caso na situação mais simples na qual \vec{k} está em uma fronteira da zona de Brillouin: $\epsilon_0(\vec{k}) = \epsilon_0(\vec{k}+\vec{G})$

$$E_{\pm} = \epsilon_0(\vec{k}) \pm |V_{\vec{G}}| \quad (\text{correção em } 1^{\text{a}} \text{ ordem em } V_{\vec{G}})$$

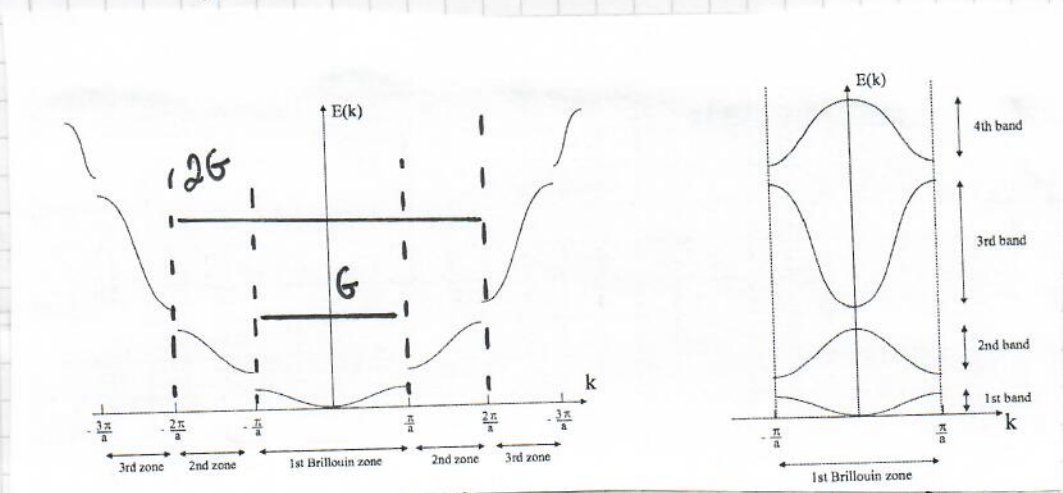
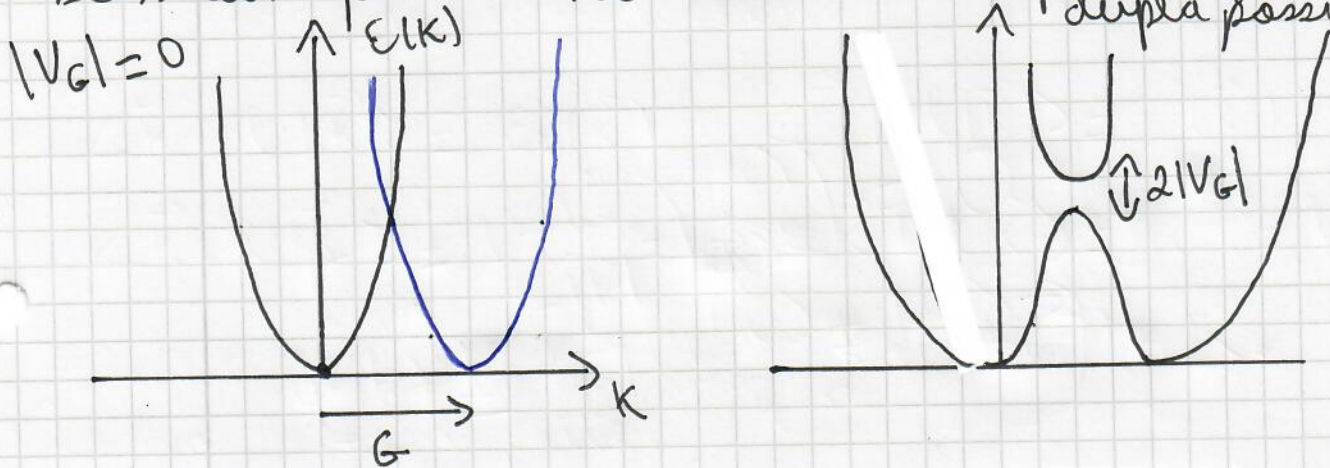
Essa equação implica que um gap agora abre na fronteira das zonas de Brillouin. *Consistente com a ordem da teoria de perturbações degeneradas.*

Nesse ponto, as bandas outrora degeneradas formam o análogo de orbitais ligantes e antiligantes.

Usando essa analogia, temos que: (4)

$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|K\rangle \pm |K'\rangle]$, $|K\rangle \propto e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$,
 que são as autofunções.

É instrutivo ilustrarmos como essas ideias se manifestam no caso 1d (apenas degenerescência dupla possível)



Esquema de zona estendida Esquema de zona reduzida

- Gaps aparecem nas bordas das zonas de Brillouin, com a dispersão essencialmente parabólica longe desses pontos
- Estrutura do espectro similar à do modelo TBH: surgem bandas de energia nas regiões onde há autoestados e gaps nas regiões proibidas
- O espectro é periódico na zona de Brillouin
- Quase momento é conservado: $\vec{k} \equiv \vec{k} + \vec{G}$.

Embora instrutiva e bastante satisfatória, (5)
nossa discussão é baseada em teoria de
perturbação e gostaríamos de ter um
resultado mais geral em mãos.

Teorema de Bloch (1928):

Os autoestados da Hamiltoniana de um
elétron em um potencial periódico são:

$$\Psi_{\vec{k}}^{\alpha} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}), \quad u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r})$$

$\alpha \rightarrow$ índice de banda

$\vec{k} \rightarrow$ quase momento ou momento do cristal

Ou seja, não importa quão forte seja o potencial
periódico o quase momento é conservado e
as autofunções são ondas planas modificadas.
Isso mostra que a intuição de Brueckel pela
qual os elétrons sofrem sucessivos espalha-
mentos com os íons da rede é incorreto para
um cristal perfeito (desvios do cristal
perfeito levam a espalhamento).

Vamos agora provar esse teorema. Começa-
mos definindo o operador translação

$$T_{\vec{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}), \quad \vec{R} = \sum n_i \vec{a}_i \text{ (vetor da rede)}$$

Como a Hamiltoniana é periódica: $\mathcal{H}(\vec{r} + \vec{R}) = \mathcal{H}(\vec{r})$

$$T_{\vec{R}} \mathcal{H} \psi = \mathcal{H}(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \mathcal{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \mathcal{H} T_{\vec{R}} \psi$$

$$\Rightarrow [T_{\vec{R}}, \mathcal{H}] = 0.$$

Ou seja podemos diagonalizar $T_{\vec{R}}$ e \mathcal{H} simultaneamente.
Além disso, esses operadores formam um
grupo abeliano:

$$T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} \Psi(\vec{r}) = T_{\vec{R}'} T_{\vec{R}} \Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}') \quad (6)$$

$$\Rightarrow T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} = T_{\vec{R}'} T_{\vec{R}} = T_{\vec{R} + \vec{R}'}$$

Com essa propriedade, podemos encontrar os autovalores desses operadores:

$$\bullet T_{\vec{R}} \underbrace{T_{\vec{R}'} \Psi}_{c(\vec{R}') \Psi} = T_{\vec{R}} c(\vec{R}') \Psi = c(\vec{R}') c(\vec{R}) \Psi$$

$$\bullet T_{\vec{R}} T_{\vec{R}'} \Psi = T_{\vec{R} + \vec{R}'} \Psi = c(\vec{R} + \vec{R}') \Psi$$

Isso quer dizer que podemos escrever esses autovalores como uma fase. Em particular, escrevemos que: $c(\vec{a}_i) = e^{2\pi i \alpha_i}$

Se agora $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ temos

$$c(\vec{R}) = c(a_1)^{n_1} c(a_2)^{n_2} c(a_3)^{n_3}$$

$$= e^{2\pi i (n_1 \alpha_1 + n_2 \alpha_2 + n_3 \alpha_3)} = e^{i \vec{K} \cdot \vec{R}},$$

$$\vec{K} = \alpha_1 \vec{b}_1 + \alpha_2 \vec{b}_2 + \alpha_3 \vec{b}_3, \quad \vec{a}_i \cdot \vec{b}_i = 2\pi \delta_{ij}$$

Mostremos então que:

$$T_{\vec{R}} \Psi_{\vec{R}}^{\alpha}(\vec{r}) = e^{i \vec{K} \cdot \vec{R}} \Psi_{\vec{R}}^{\alpha}(\vec{r})$$

$$\Psi_{\vec{R}}^{\alpha}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i \vec{K} \cdot \vec{R}} \Psi_{\vec{R}}^{\alpha}(\vec{r}),$$

que é uma forma alternativa do teorema de Bloch.

Para finalizar, podemos fixar os valores de α_i por meio das condições de contorno

$$\Psi_{\vec{R}}^{\alpha}(\vec{r} + N \vec{a}_i) = e^{i N \vec{K} \cdot \vec{a}_i} \Psi_{\vec{R}}^{\alpha}(\vec{r})$$

Para condições periódicas de contorno:

$$e^{i N \vec{K} \cdot \vec{a}_i} = 1 \Rightarrow e^{2\pi i N \alpha_i} = 1 \Rightarrow \alpha_i = m_i / N, m_i \in \mathbb{Z}$$

que é análoga à de elétrons livres para um cristal cúbico, mas geral.

Antes de explorar as consequências físicas (4) do teorema de Bloch, vamos discutir outro conjunto de funções de onda muito importantes: as funções de Wannier:

$$u_{\alpha}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r})$$

Enquanto as funções de Bloch são estendidas por todo o cristal, as funções de Wannier são localizadas ao redor dos sítios da rede. Formalmente, elas formam na qual escreveremos o TBH e fornecem um entendimento complementar ao de Bloch (localizado em vez de estendido)

$$\begin{aligned} u_{\alpha}(\vec{R} + \vec{R}', \vec{r} + \vec{R}') &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{\vec{k}} e^{-2i\vec{k} \cdot \vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) \\ &= u_{\alpha}(\vec{R}, \vec{r}) \Rightarrow u_{\alpha}(\vec{R}, \vec{r}) \equiv u_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) \end{aligned}$$

As funções de Wannier não são únicas pois sempre podemos fazer a rotação $\psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) \rightarrow e^{i\vec{R}(\vec{k})} \psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r})$. Escolhas diferentes de $\mathcal{R}(\vec{k})$ levam a diferentes graus de localização de $u_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R})$ ao redor do sítio \vec{R} .

As funções de Wannier definidas em sítios diferentes são ortogonais: (omitemos)

$$\begin{aligned} \int d^3r u^*(\vec{r} - \vec{R}') u(\vec{r} - \vec{R}) &= \frac{1}{L^3} \int d^3r \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \underbrace{\psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})}_{\delta_{\vec{k}', \vec{k}}} \\ &= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})} \\ &= \delta_{\vec{R}' - \vec{R}}, 0, \text{ q.e.d.} \end{aligned}$$

ortogonalidade das funções de Bloch.

Vamos agora explorar algumas consequências (8) do teorema de Bloch. O operador

momento $\vec{p} = \hbar \nabla$ quando atuando em um estado de Bloch nos dá

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \Psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) &= -i\hbar \nabla e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) \\ &= \hbar \vec{k} \Psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) - i\hbar e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \nabla u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) \\ &\neq \text{constante} \cdot \Psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}). \end{aligned}$$

O que é conservado é o quase momento.

Por ora, vamos pensar em \vec{k} apenas como um bom número quântico que captura a simetria translacional discreta de $V(\vec{r})$.

Por outro lado, podemos mostrar que os elétrons de Bloch movem-se com uma velocidade média dada por:

$$v_{\alpha}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_{\alpha}(\vec{k}), \text{ onde } E_{\alpha}(\vec{k}) \text{ são}$$

os autoestados de Bloch para a banda α .

Esse é um resultado fantástico. Ele diz que há estados estacionários para um elétron movendo-se em potencial periódico nos quais, apesar da interação do elétron com a rede, ele se move sem degradar sua velocidade média. É um resultado bem diferente daquele proveniente da intuição clássica do modelo de Drude. Exploraremos sua importância no futuro. Aqui, vamos apenas mostrar que esse resultado é válido.

$$v_{\alpha}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \langle \Psi | \vec{p} | \Psi \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \Psi | -i\hbar \nabla | \Psi \rangle$$

Vamos agora aplicar \mathcal{H} em $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ com ⑨

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \text{ e } \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\bullet \vec{p} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{p} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\begin{aligned} \bullet \vec{p} \cdot \vec{p} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= (\hbar \vec{k})^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) + 2e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{k} \cdot \vec{p} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &\quad + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{p}^2 u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (\vec{p} + \hbar \vec{k})^2 u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (-i\hbar \nabla + \hbar \vec{k})^2 u_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Com esse resultado podemos escrever

$$\mathcal{H} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k}) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla + \vec{k})^2 + V(\vec{r}) \right] u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k}) u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\mathcal{H}_{\vec{k}} u_{\vec{k}} = E(\vec{k}) u_{\vec{k}}$$

Vamos agora considerar um truque muito útil. Vamos considerar $\mathcal{H}_{\vec{k}+\vec{q}}$ e expandir essa expressão até 1ª ordem

$$\mathcal{H}_{\vec{k}+\vec{q}} = \frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla + \vec{k} + \vec{q})^2 + V(\vec{r})$$

$$\approx \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla + \vec{k})^2 + V(\vec{r})}_{\mathcal{H}_{\vec{k}}} + \frac{\hbar^2}{m} (-i\nabla + \vec{k}) \cdot \vec{q} + \dots$$

Se encararmos o segundo termo como uma perturbação para $\mathcal{H}_{\vec{k}}$ temos

$$\Delta E = \langle u_{\vec{k}} | \frac{\hbar^2}{m} (-i\nabla + \vec{k}) \cdot \vec{q} | u_{\vec{k}} \rangle \text{ (1ª ordem)}$$

Contudo, também sabemos que

$$E(\vec{k} + \vec{q}) = E(\vec{k}) + \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \cdot \vec{q} + \dots,$$

$$\text{com } \mathcal{H}_{\vec{k}+\vec{q}} u_{\vec{k}+\vec{q}} = E(\vec{k}+\vec{q}) u_{\vec{k}+\vec{q}}$$

Comparando as duas expressões:

$$\langle U_{\vec{k}} | \frac{\hbar^2}{m} (-i \cdot \nabla + \vec{k}) | U_{\vec{k}} \rangle = \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \quad (10)$$

$$\langle \Psi_{\vec{k}} | \frac{\hbar^2}{m} (-i \cdot \nabla) | \Psi_{\vec{k}} \rangle = \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

\parallel
 $\hbar \vec{\Theta}(\vec{k})$

$$\Rightarrow \vec{\Theta}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

Esse resultado também implica que a velocidade é nula nos extremos da energia. Para esses valores de \vec{k} , o elétron fica localizado (imóvel). Esses pontos extremos levam a singularidades na densidade de estados local conhecidos com singularidades de van Hove. Elas são fracas em 3d, mas bem proeminentes em 1d e 2d. Esse é um efeito não trivial de $V(r)$.

Vamos agora explorar um pouco a superfície de Fermi para elétrons não-interagentes que se movem em um cristal. Vamos discutir exemplos para uma rede quadrada porque é mais simples de desenhar as zonas de Brillouin e esse exemplo já ilustra várias propriedades gerais.

• Uma rede de Bravais com N sítios possui N estados de momento disponíveis na 1ª BZ. O número de bandas será igual ao número de sítios na célula unitária. Por causa do spin, podemos acomodar $2N$ elétrons por estado de momento por banda.

• Cada um dos sítios da rede contribui com (11) um número Z de elétrons. Esses são os elétrons de valência

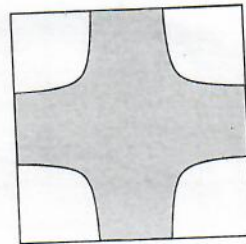
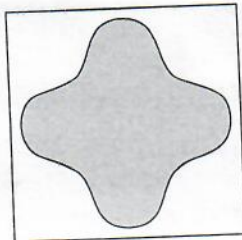
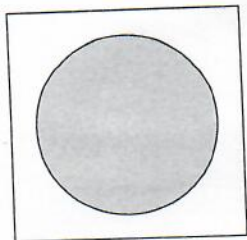
- $Z = 1$

Nesse caso os N elétrons podem ser acomodados confortavelmente na 1^a BZ. Sabemos de nossa análise perturbativa que o efeito da rede é reduzir a energia na fronteira da BZ. Portanto esperamos que estados mais próximos das bordas sejam preenchidos primeiro. Para que FS (superfície de Fermi) seja uma superfície suave devemos ter $\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = 0$ aí.

$|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}| = 0$

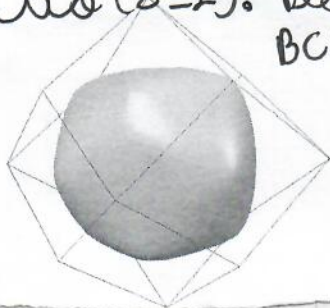
$|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}| \ll 1$

$|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}| \sim O(L)$

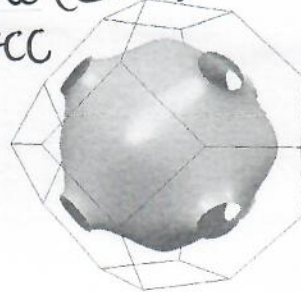


Área da FS não muda. Fixada pelo # de elétrons

Lítio ($Z=1$). Rede BCC



Cobre ($Z=1$) Rede FCC



FS para o lítio e o cobre. Nos dois casos temos a manifestação do nosso cenário.

Em todos esses casos, há estados disponíveis com energia arbitrariamente próximas de E_F . Temos então um metal. Como vemos no modelo de Sommerfeld, apenas os elétrons próximos da

superfície de Fermi podem ser excitados. (12)

Isso faz com que o conhecimento da forma da FS seja importante.

No ponto de vista teórico, os metais constituem um interessante desafio pois possuem um grande número de excitações de baixa energia disponível (\propto à área da FS)

- $Z = 2$

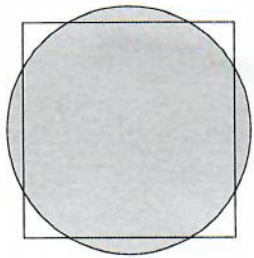
Nesse caso temos $2N$ elétrons e, em princípio, poderíamos preencher todos os estados da 1^{a} BZ. Contudo, não é isso que ocorre se $|V_G| \ll 1$. Os elétrons preenchem parcialmente a 1^{a} BZ e ainda sobram para a 2^{a} BZ.

Terminamos com uma FS mais complicada (elétrons e buracos em bolsões) mas ainda um metal. Se agora $|V_G| \sim 0(1)$, o gap entre essas duas bandas é grande o suficiente para confinar todos os elétrons à 1^{a} BZ e terminamos com um isolante: não há FS e excitações de baixa energia.

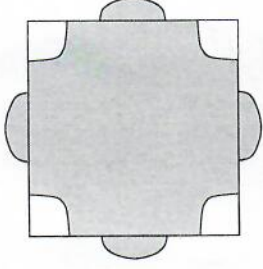
Todo elétron que deseja mudar seu estado precisa pagar um gap $\Delta \sim 2|V_G|^2$. Esses isolantes são conhecidos como isolantes de banda para ressaltar o fato que é sua estrutura de banda que impede o movimento dos elétrons. Regra geral $\forall Z$:

- Metais: bandas parcialmente preenchidas;
- Isolantes: bandas totalmente preenchidas;

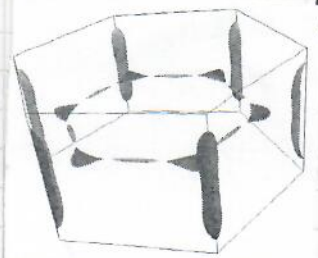
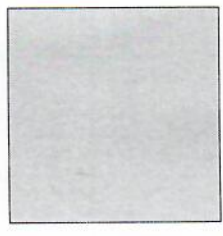
$$|v_F| = 0$$



$$|v_F| < v_L$$



$$|v_F| \sim 0 < v_L$$



(13)

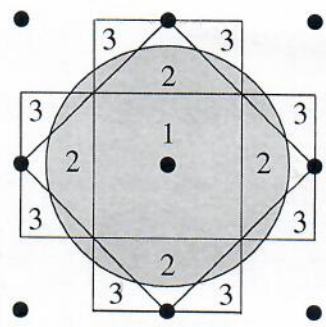
Berílio ($Z=2$)

Note que um metal pode possuir várias bandas preenchidas (bandas de valência) até chegarmos a uma banda semi-preenchida (banda de valência)

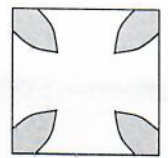
- $Z=3$

Aqui, a superfície de Fermi pode existir em diferentes bandas e a situação rapidamente se complica

FS para $Z=3$.
A FS é sempre conectada.



1st zone



3rd zone



2nd zone



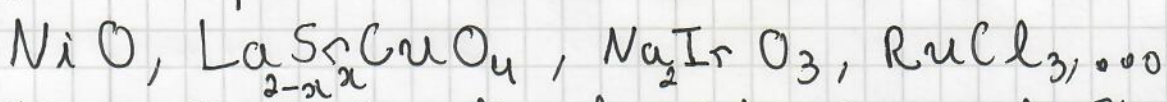
3rd zone re-drawn

comentários gerais.

- Teoria de bandas nos permite classificar os materiais como metais ou isolantes;
- Para isolantes, a energia necessária para acessar os primeiros estados excitados é o gap Δ . Se $\Delta \leq 2 eV$ temos os semicondutores. Nesse caso, os elétrons são excitados termicamente e sua condutividade aumenta com T . Veremos mais sobre eles em breve.
- Por muito tempo, isolantes de banda foram

considerados um assunto entediante pois eles não são facilmente manipulados nem possuem física interessante. Isso mudou a partir de 2005/2006 com o advento dos chamados isolantes topológicos. Sua assinatura mais marcante é a presença de estados condutores em suas bordas com propriedades surpreendentes.

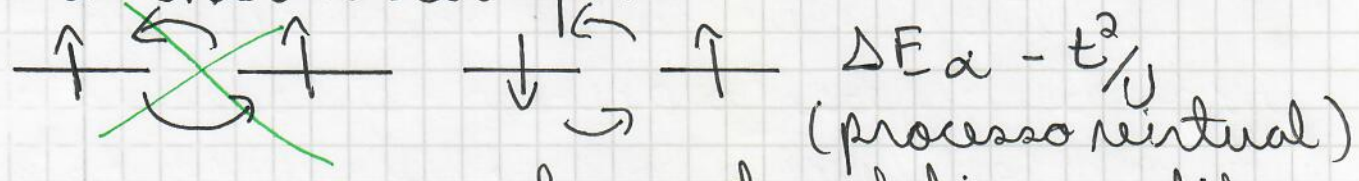
Existem materiais para os quais $Z = 1$ e ainda sim temos isolantes. Esses são os famosos isolantes de Mott (1949):



Eles são isolantes devido à repulsão Coulombiana entre os elétrons:



Se $U \gg t$, o hopping é desencorajado e todos os elétrons ficam parados. Aparece um gap de carga. Contudo, ainda sobra a dinâmica dos spins



Aparece um acoplamento efetivo antiferromagnético entre os spins dos elétrons:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad J > 0 \quad (\text{spin antialinhados})$$

Hamiltoniana de Heisenberg.