

Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

1100-3003



Ciało stałe 4

Wydział Fizyki UW

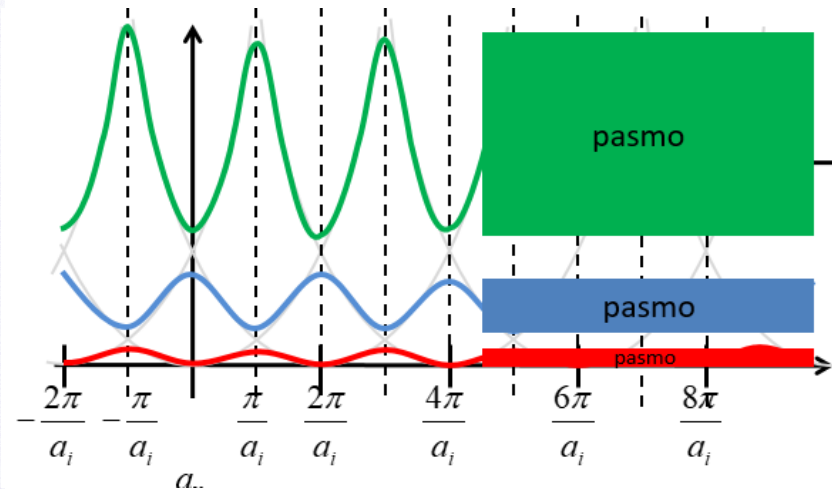
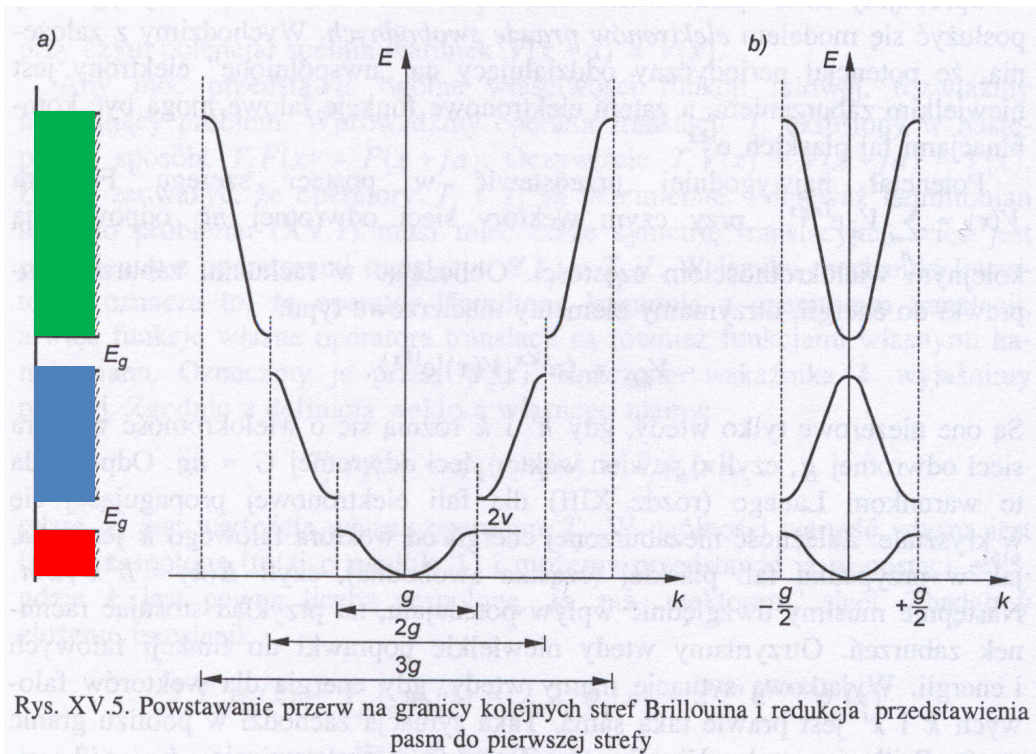
Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

Piotr.Fita@fuw.edu.pl

Nasz cel:

Twierdzenie Blocha

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



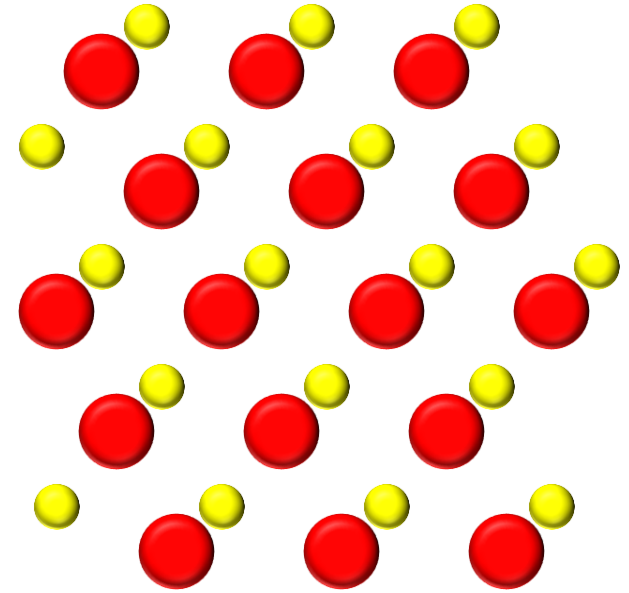
Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

funkcja Blocha,
stan Blocha

amplituda Blocha,
obwiednia Blocha



Pokazaliśmy, że rozwiązanie jednoelektronowego równania Schrödingera w potencjale periodycznym ma postać modulowanej fali płaskiej o okresie sieci:

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

Wprowadziliśmy oznaczenie n dla różnych rozwiązań odpowiadających temu samemu \vec{k} (*indeks pasm*). Wektor \vec{k} należy wtedy do *pierwszej strefy Brillouina*.

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Przykład:

Ruch elektronu w potencjale periodycznym.

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} \exp(i\vec{G}\vec{r})$$
$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

Rozwiązaniem jest oczywiście:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

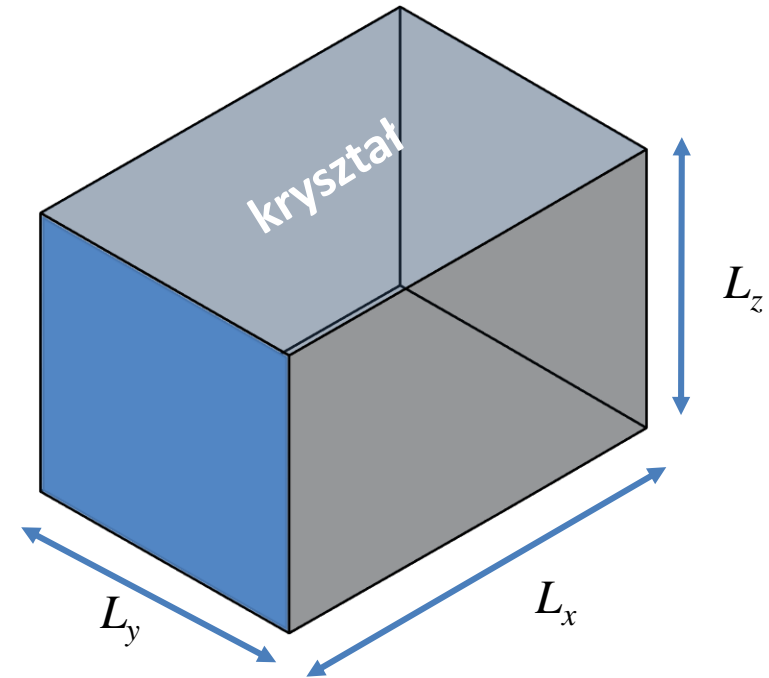
Łatwo można pokazać (*Ibach, Luth*):

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

Tym razem $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ dostajemy $\hat{p}\psi(\vec{r}) = -i\hbar(i\vec{k} + \nabla)u_{n,\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{r}} \neq \hbar\vec{k}\psi(\vec{r})$.

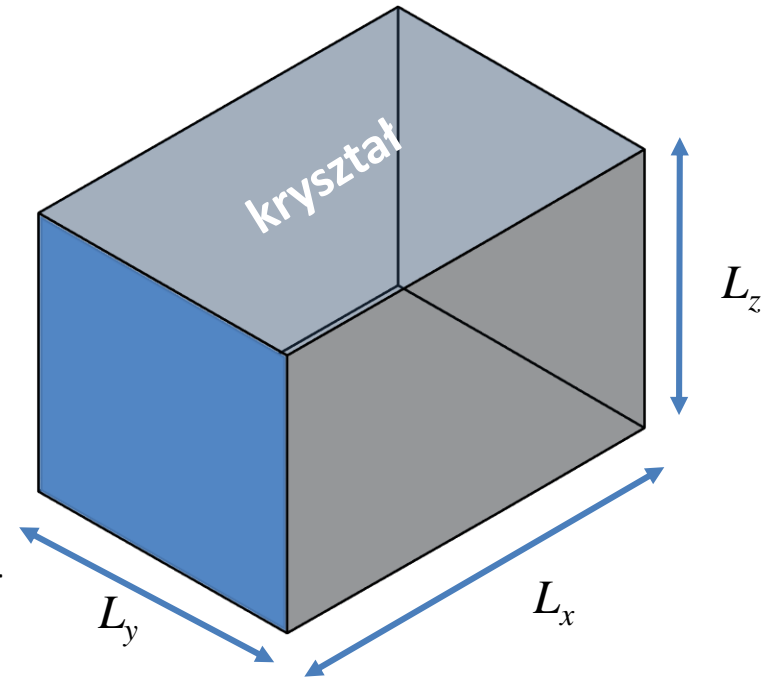
Funkcja Blocha nie opisuje elektronu o dobrze określonym pędzie!

$\hbar\vec{k}$ nazywa się *kwazipędem* lub *pędem krystalicznym*.



Potencjał periodyczny

- kryształy są skończonych rozmiarów – można wprowadzić warunki brzegowe znikania funkcji falowej na brzegach kryształu. Prowadzi to jednak do tego, że wszystkie fale (elektronowe, sieciowe etc.) będą stojące, co w wielu wypadkach utrudnia opis
- ponieważ w kryształach makroskopowych drogi swobodne elektronów są dużo mniejsze niż rozmiary kryształów, najwygodniejszym rozwiązaniem jest przyjęcie tzw. warunków periodyczności Borna-Karmana: $\Psi(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) = \Psi(\vec{r})$ ($j = 1,2,3$)



gdzie \vec{a}_j są wektorami sieci Bravais, a N_j dużymi liczbami całkowitymi, takimi że $N_j a_j = L_j$ jest rozmiaru całego kryształu.

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \vec{k}_i jest skończony (choć olbrzymi!).

$$\vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_i}, \pm \frac{4\pi}{L_i}, \pm \frac{6\pi}{L_i}, \dots, \pm \frac{2\pi n_i}{L_i}$$

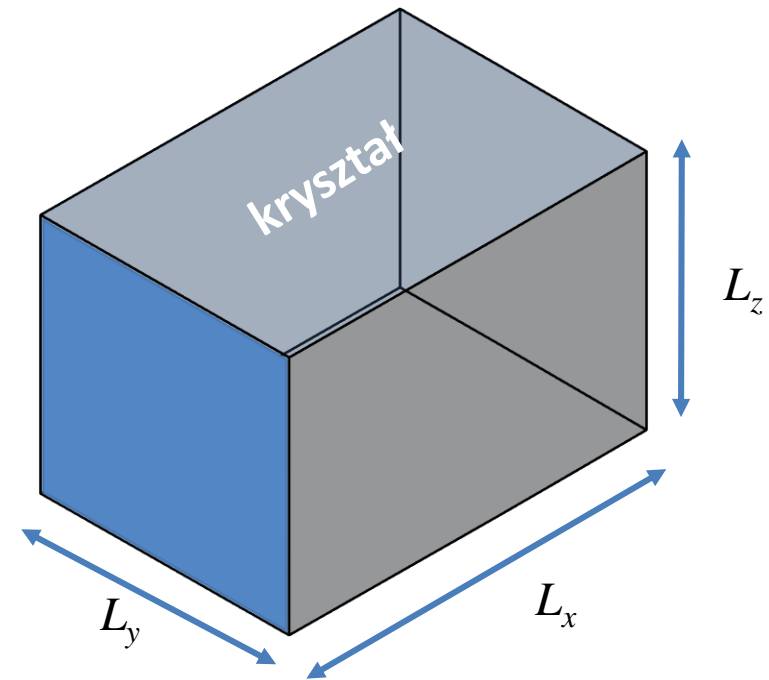
Potencjał periodyczny

W przypadku funkcji Blocha $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$:

$$\begin{aligned}\varphi_{\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) &= u_{\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) e^{i\vec{k}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j)} \\ &= u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}N_j \vec{a}_j}\end{aligned}$$

Musimy zażądać, żeby $e^{i\vec{k}N_j \vec{a}_j} = 1$

$$\vec{k}_j = 0, \pm \frac{2\pi}{L_j}, \pm \frac{4\pi}{L_j}, \dots, \pm \frac{2\pi N_j}{L_j}$$



dozwolone wektory falowe stanowią dyskretną sieć punktów równomiernie rozłożoną w przestrzeni wektora falowego; komórkę elementarną sieci odwrotnej (strefę Brillouina) wypełnia

$$N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

takich punktów. Tyle też będzie stanów w każdym paśmie. N_1, N_2, N_3 mogą być różne, ale najczęściej przyjmujemy takie same

Gęstość stanów

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \mathbf{k} jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć okresowe warunki brzegowe i wtedy:

Warunki Born-Karmana

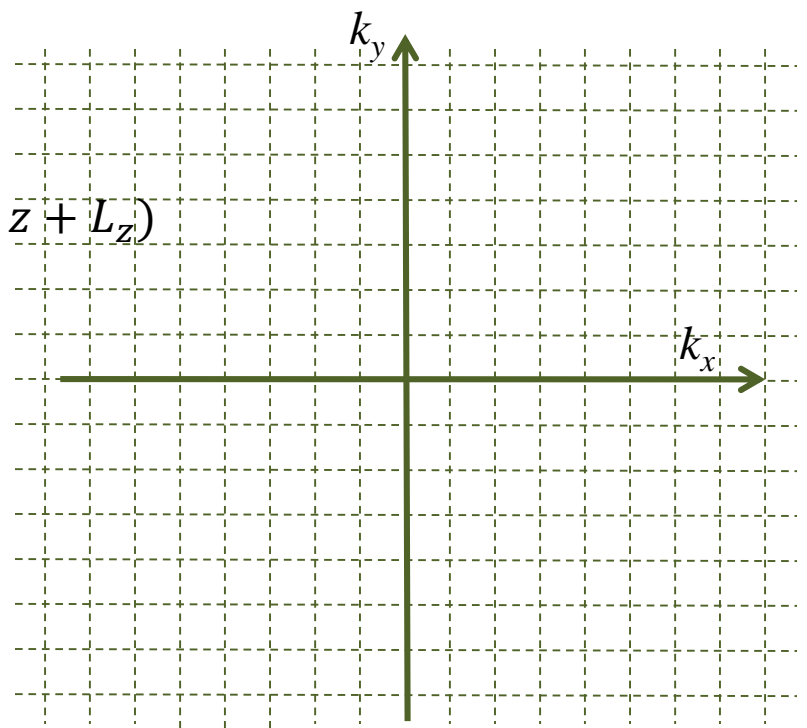
Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

$\psi_{n,\vec{k}}$ – postać funkcji Blocha

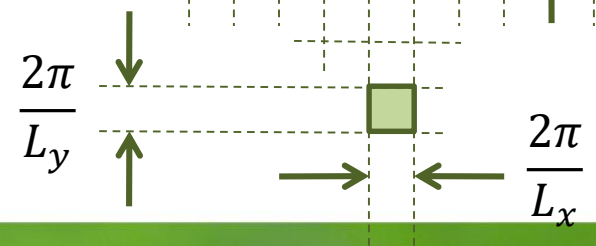
$$\psi_{n,\vec{k}}(x + L_x, y, z) = \psi_{n,\vec{k}}(x, y + L_y, z) = \psi_{n,\vec{k}}(x, y, z + L_z)$$

$$\begin{aligned} e^{ik_x L_x} &= 1 \\ e^{ik_y L_y} &= 1 \\ e^{ik_z L_z} &= 1 \end{aligned}$$

$$\vec{k}_j = 0, \pm \frac{2\pi}{L_j}, \pm \frac{4\pi}{L_j}, \dots, \pm \frac{2\pi N_j}{L_j}$$



Ilość stanów w objętości = $\frac{2}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{2V}{(2\pi)^3}$



Density of states

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \mathbf{k} jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć okresowe warunki brzegowe i wtedy:

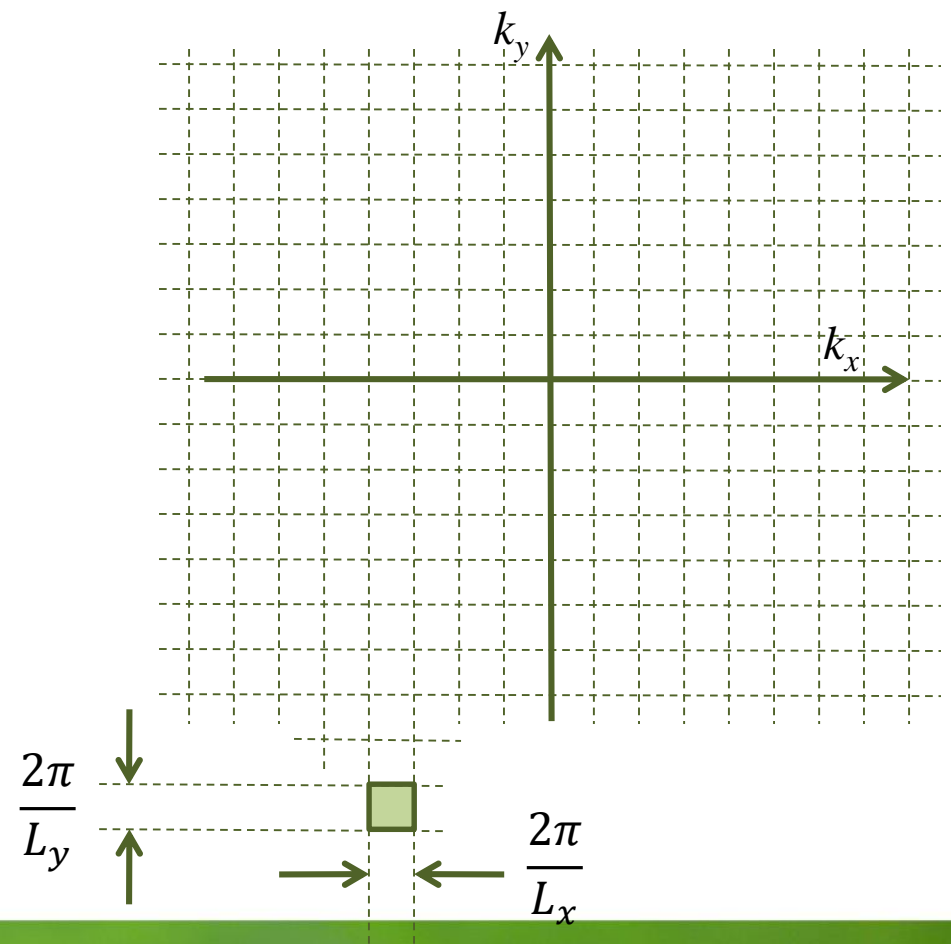
Gęstość stanów w przestrzeni k
 n wymiarowej (na jednostkę objętości)

Case 3D: $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3$

Case 2D: $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2$

Case 1D: $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^1$

Ilość stanów w objętości $= \frac{2}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{2V}{(2\pi)^3}$



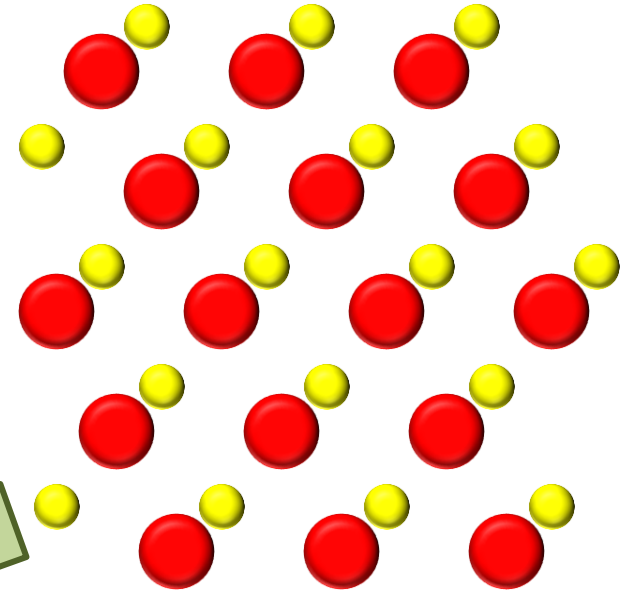
Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

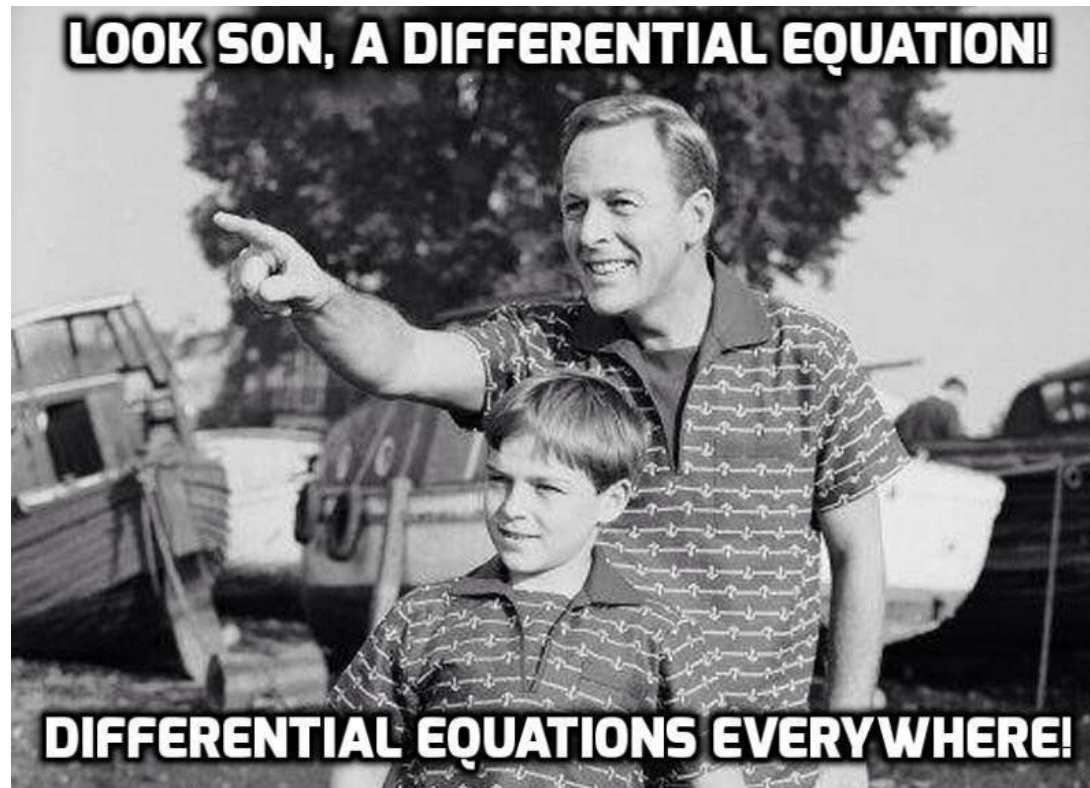
Właściwości funkcji Blocha: $\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$

1. $u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
2. $\varphi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
3. $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$
4. Inwersja w przestrzeni $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$
5. Inwersja w czasie (bez pola magnetycznego)
 $E_n(\vec{k}, \uparrow) = E_n(-\vec{k}, \downarrow)$

Przy tablicy



Periodic potential



Periodic potential

Bloch theorem

Periodic potential we can expand as a Fourier series:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} \exp(i\vec{G}\vec{r})$$

The wavefunction can be represented as a sum of plane waves of different wavelengths satisfying periodic boundary conditions :

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) = \dots = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{G}}^{BZ} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

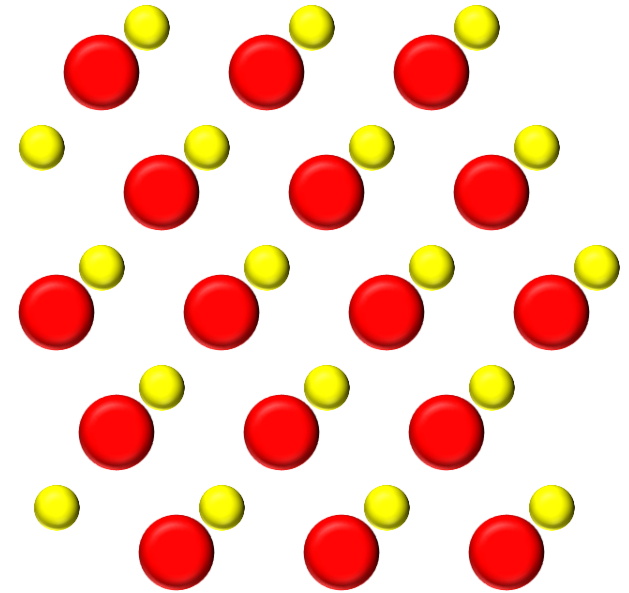
Schrödinger equation:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$$

We will show that!

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) + \sum_{\vec{k}, \vec{G}} C_{\vec{k}} V_{\vec{G}} \exp[i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}] = E \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

This is an equation for E and $C_{\vec{k}}$ for all vectors \vec{k}, \vec{r} and \vec{G} .



See also: Ibach, Luth „Solid State Physics”

Periodic potential

Bloch theorem

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) + \sum_{\vec{k}, \vec{G}} C_{\vec{k}} V_{\vec{G}} \exp[i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}] = E \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

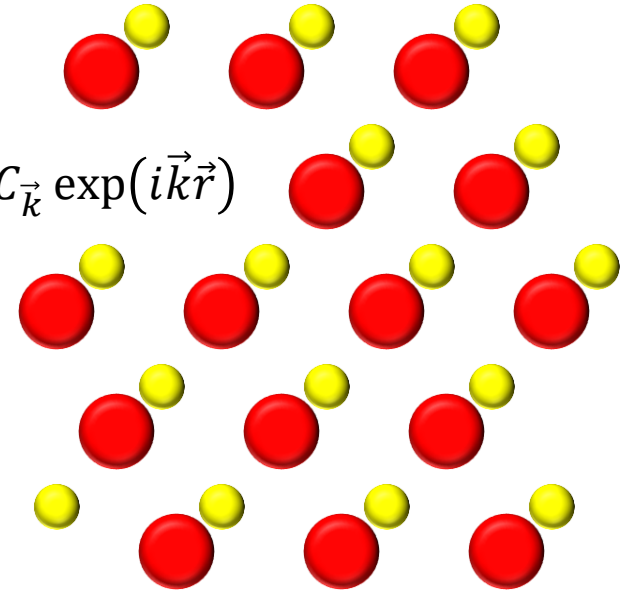
The sum is over all \vec{k}, \vec{G} , therefore:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \vec{G}} C_{\vec{k}} V_{\vec{G}} \exp[i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}] &= \dots \vec{k} + \vec{G} \rightarrow \vec{k} \dots \\ &= \sum_{\vec{k}, \vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} V_{\vec{G}} \exp[i\vec{k}\vec{r}] \end{aligned}$$

We get Schrödinger equation in a form:

$$\sum_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) \left[\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} V_{\vec{G}} \right] = 0$$

That must be met for each vector \vec{r} .



Periodic potential

Bloch theorem

$$\sum_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) \left[\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} V_{\vec{G}} \right] = 0$$

for each vector \vec{r} .

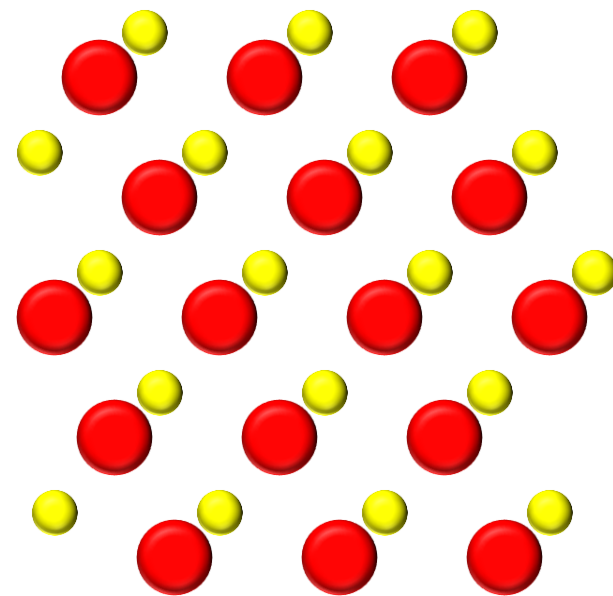
Thus, for each vector \vec{k} we got equation for coefficients $C_{\vec{k}}$ and E :

$$\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} V_{\vec{G}} = 0$$

In this equation for $C_{\vec{k}}$ also coefficients shifted by \vec{G} like $C_{\vec{k}-\vec{G}_1}, C_{\vec{k}-\vec{G}_2}, C_{\vec{k}-\vec{G}_3}$ appear (but others do not, even when we started for any \vec{k} !).

This equation couples those expansion coefficients $\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$, whose \vec{k} - values differ from one another by a reciprocal lattice vector \vec{G} .

Conclusion?



Try to plot the matrix of this equation

$$\begin{bmatrix} C_{k_1} \\ C_{k_2} \\ C_{k_2} \\ \dots \\ C_{k_n} \end{bmatrix}$$

Periodic potential

Bloch theorem

$$\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - E\right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} V_{\vec{G}} = 0$$

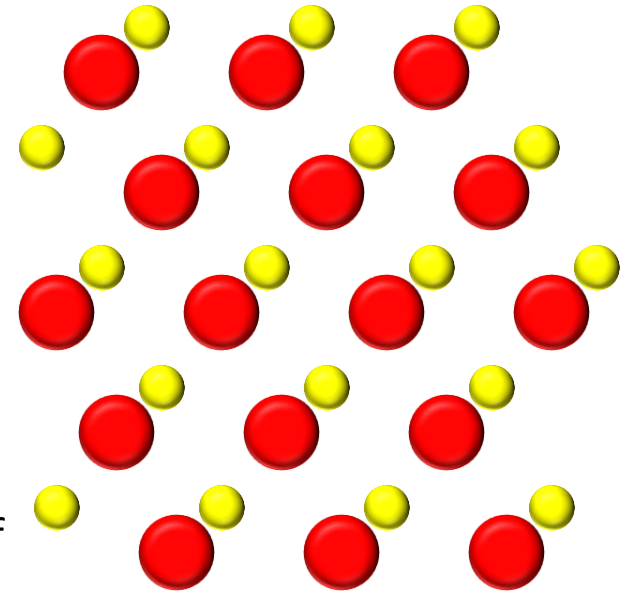
We do not need to solve these equations for all vectors \vec{G} – we can find a solution in **one** unit cell of the reciprocal lattice and copy it N times (N – number of unit cells)!

Thus we can find eigenvalues $E \rightarrow E_{\vec{k}} \rightarrow E(\vec{k})$ corresponding to the wave-function $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ represented as a superposition of plane waves whose wave vectors \vec{k} differ only by reciprocal lattice vectors \vec{G} .

Wave vector \vec{k} is a good quantum number according to which the energy eigenvalues and quantum states may be indexed. Thus the function $\varphi(\vec{r})$ is the superposition of $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ of energies $E(\vec{k})$

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) = \dots = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{G}}^{BZ} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

(later on we introduce coefficient n for different solutions of $E_{\vec{k}}$ corresponding to the same \vec{k})



Periodic potential

Bloch theorem

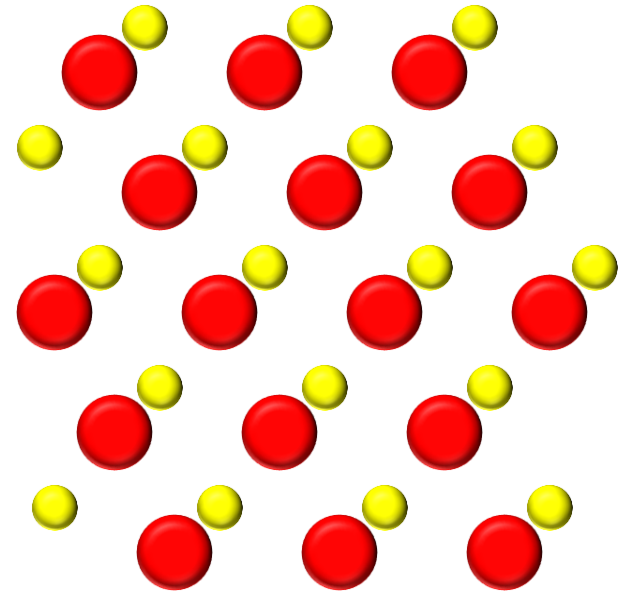
Wave-function which is the solution of the Schrodinger equation $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ is represented as a superposition of plane waves whose wave vectors \vec{k} differ only by reciprocal lattice vectors \vec{G} and it has energies $E_{\vec{k}} = E(\vec{k})$:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} \exp[i(\vec{k} - \vec{G})\vec{r}]$$

Each vector $\vec{k} - \vec{G}$ can enumerate states; it is convenient to choose the shortest vector (which belongs to the first Brillouin zone).

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

The function $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ is a Fourier series over reciprocal lattice points \vec{G} , and thus has the periodicity of the lattice.



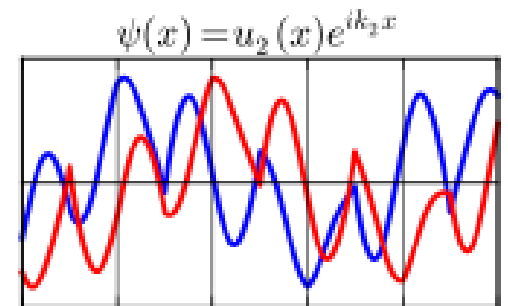
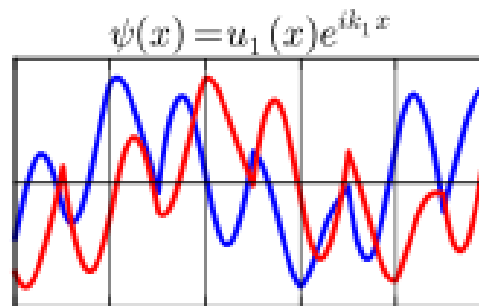
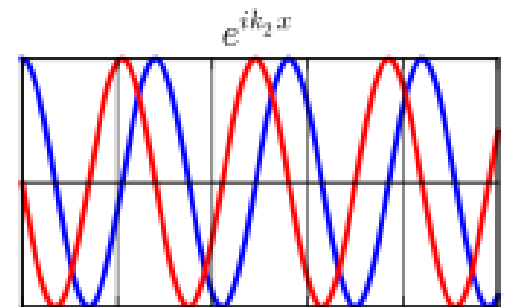
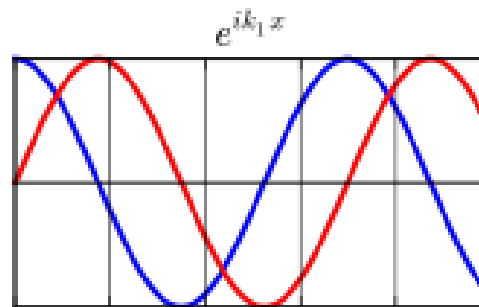
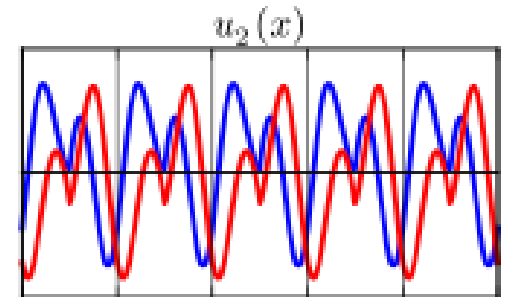
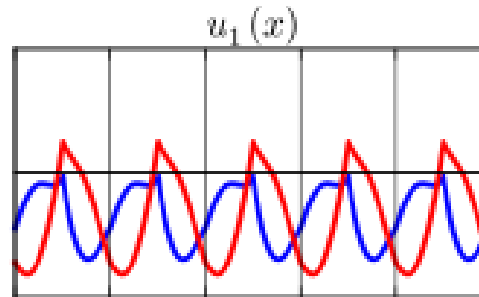
Conclusion?

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Funkcje Blocha, których wektory falowe różnią się o wektor sieci odwrotnej są IDENTYCZNE!

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



$$\vec{k}_1 - \vec{k}_2 = \vec{G}$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Funkcje Blocha, których wektory falowe różnią się o wektor przestrzeni odwrotnej \vec{G} są takie same!

$$\psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \quad \vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

Dowód:

$$\dots \Rightarrow \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C(\vec{k} - \vec{G}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\begin{aligned} \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) &= u_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}} = \sum_{\vec{G}'} C(\vec{k} + \vec{G} - \vec{G}') e^{-i\vec{G}'\vec{r}} e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}} = \dots \\ &= \sum_{\vec{G}''} C(\vec{k} - \vec{G}'') e^{-i\vec{G}''\vec{r}} e^{i(\vec{k})\vec{r}} = \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Co z energią?

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = E(n, \vec{k}) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r})$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Funkcje Blocha, których wektory falowe różnią się o wektor przestrzeni odwrotnej \vec{G} są takie same!

$$\psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

Dowód:

$$\dots \Rightarrow \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C(\vec{k} - \vec{G}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\begin{aligned} \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) &= u_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}} = \sum_{\vec{G}'} C(\vec{k} + \vec{G} - \vec{G}') e^{-i\vec{G}'\vec{r}} e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}} = \dots \\ &= \sum_{\vec{G}''} C(\vec{k} - \vec{G}'') e^{-i\vec{G}''\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} = \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Co z energią?

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = E(n, \vec{k}) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r})$$

Energia jest periodyczną funkcją wektora falowego \vec{k} !

$$\Rightarrow E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

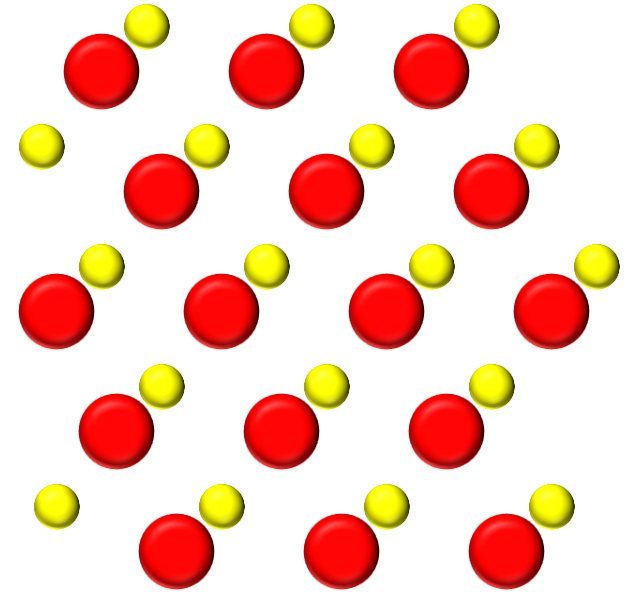
Właściwości funkcji Blocha: $\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$

1. $u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
2. $\varphi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
3. $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$

Przy tablicy

Dla potencjału periodycznego dążącego do zera (model prawie swobodnych elektronów):

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G}) \approx \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

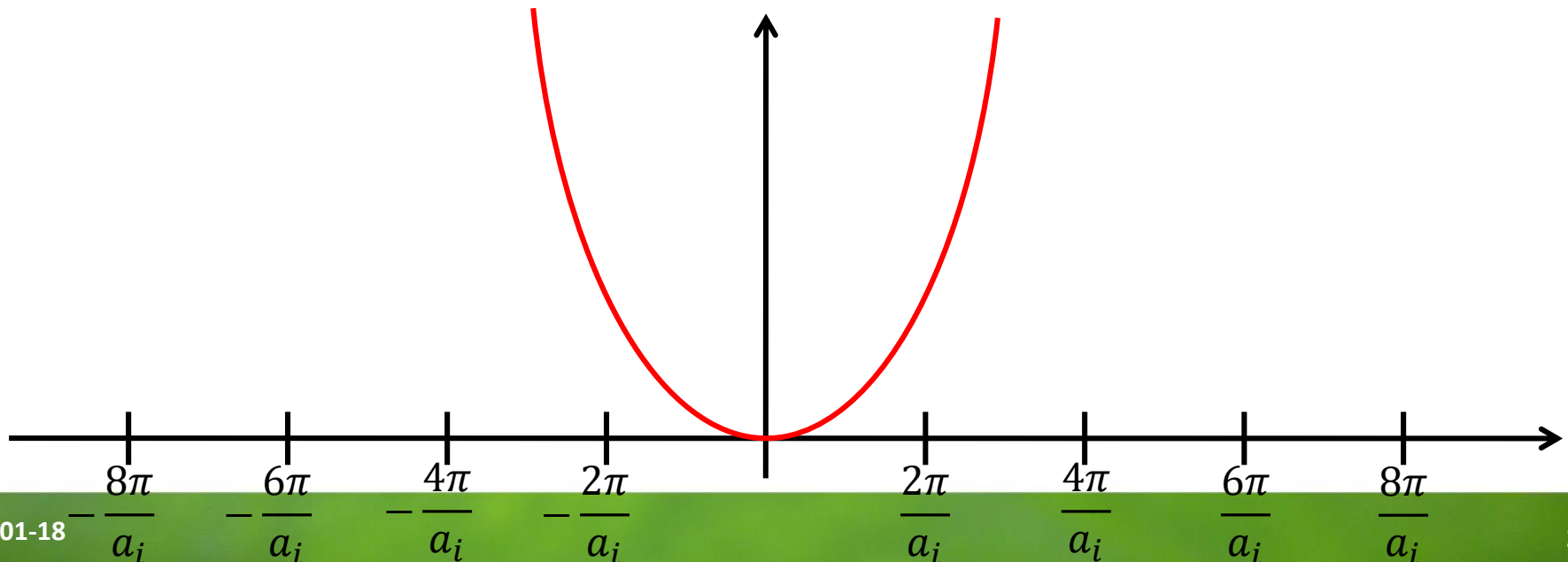
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

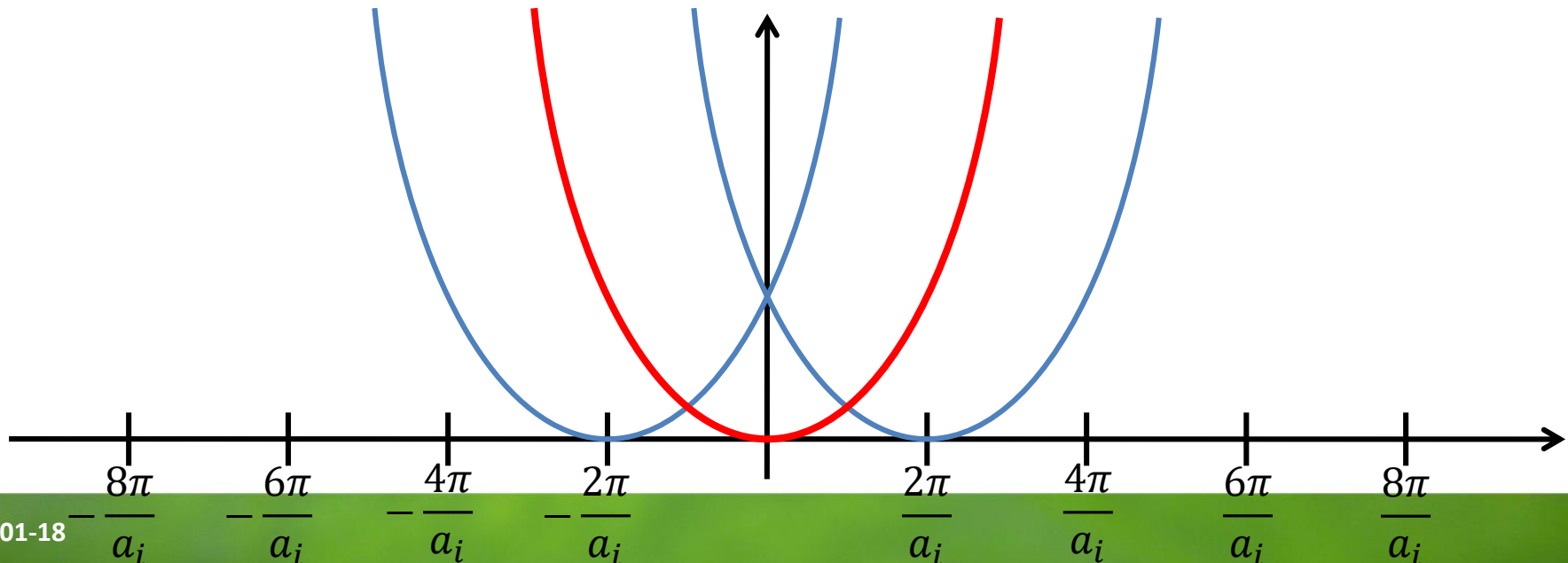
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

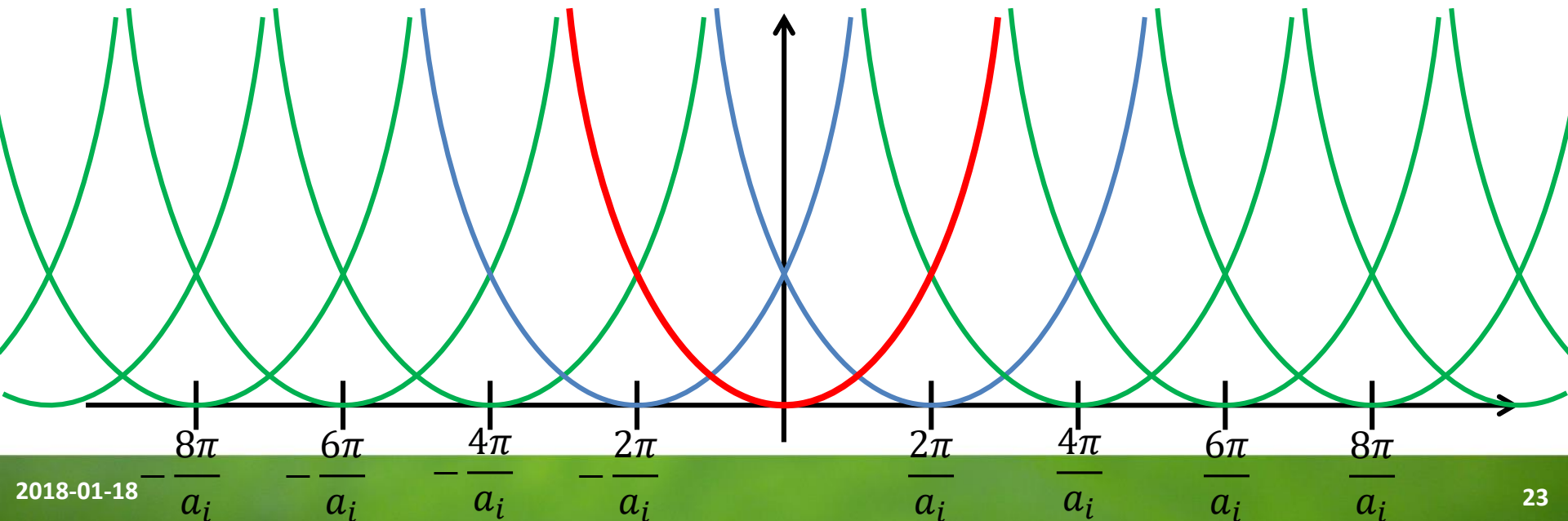
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

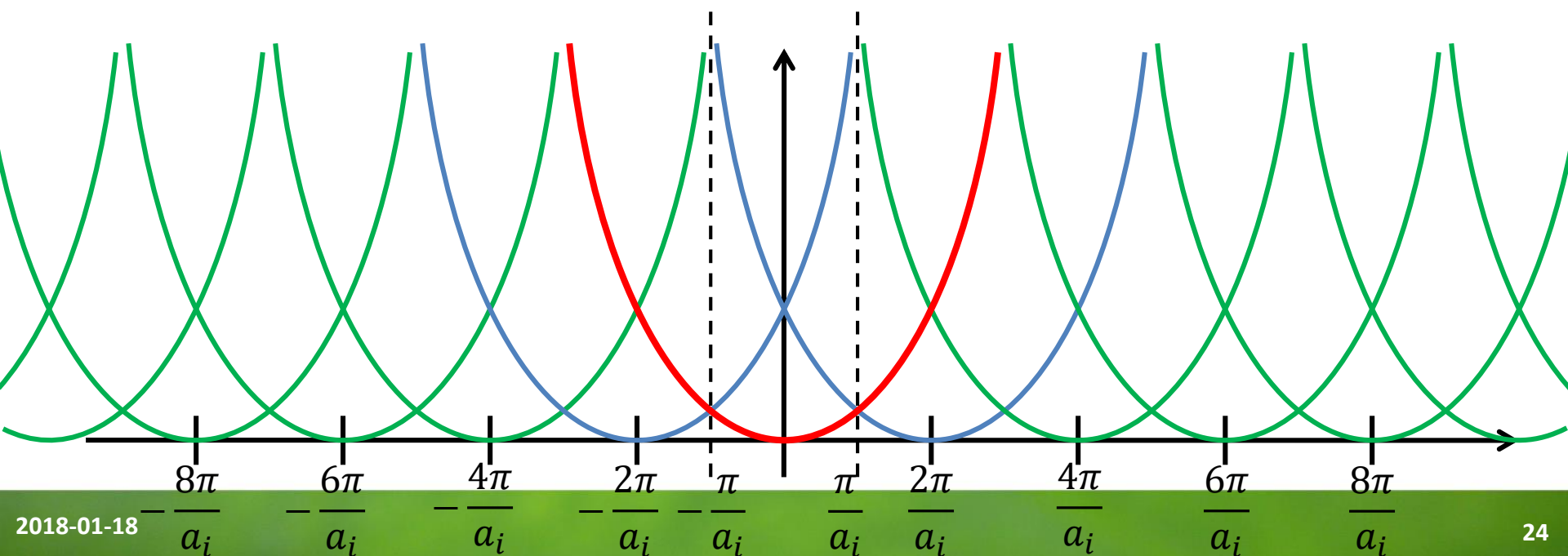
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

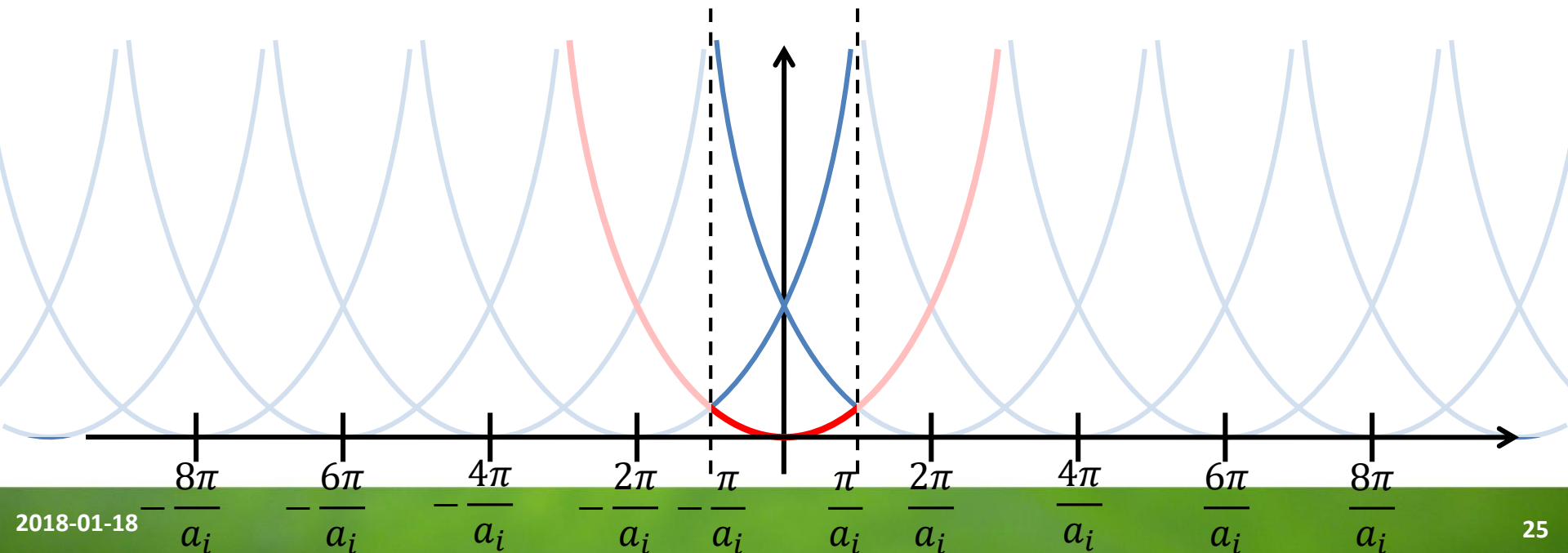
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

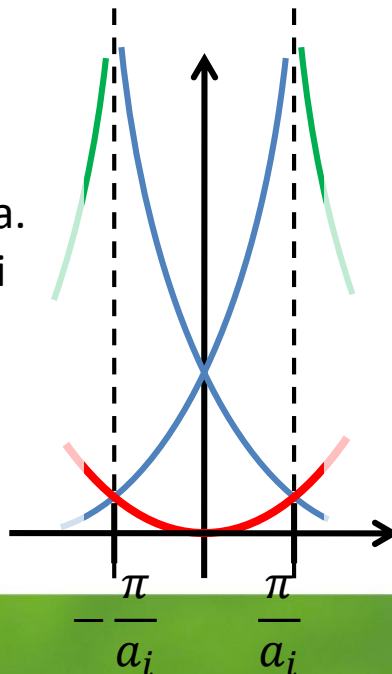
$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

Jest tzw. zredukowana strefa Brillouina.
Na granicy strefy $\pm G/2 = \pm \pi/a$ wartości energii są zdegenerowane.



Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

Wektor \vec{k}_g na granicy I strefy Brillouina $\vec{k}_g = \frac{1}{2}\vec{G}$

Pokazać: $|\vec{k}_g - \vec{G}| = |\vec{k}_g|$ (wskazówka: policz $|\vec{k}_g - \vec{G}|^2$)

Wektor $\vec{k}_g - \vec{G} = \vec{k}'_g$ leży po przeciwnej stronie I strefy Brillouina i jest równoważny wektorowi \vec{k}_g . Wektory \vec{k}_g i \vec{k}'_g spełniają warunek Lauego: $\vec{k}_g - \vec{k}'_g = \Delta\vec{k} = \vec{G}$

Stany $\varphi_{\vec{k}_g}(\vec{r})$ z granicy I strefy Brillouina odpowiadają elektronowym falom stojącym (pokazać!)

Przypomnienie:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

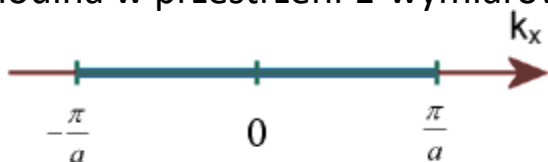
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

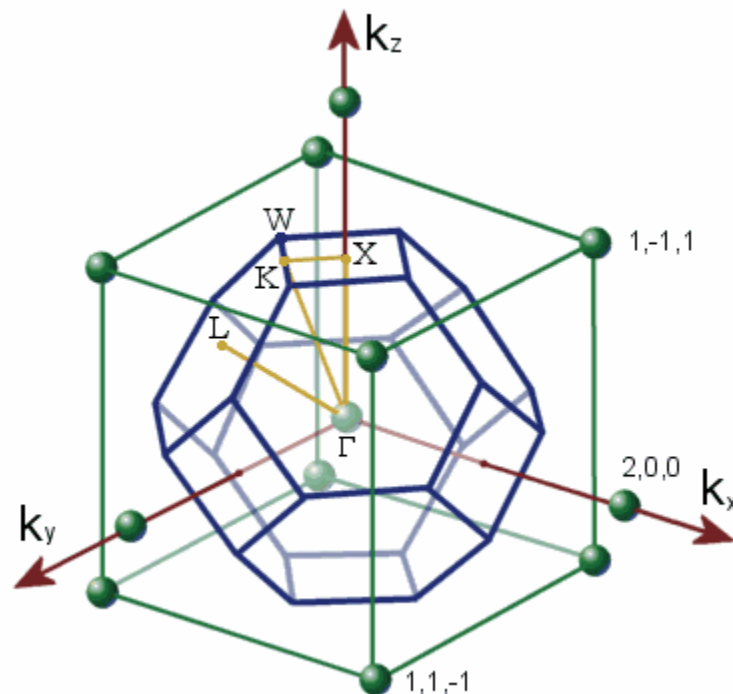
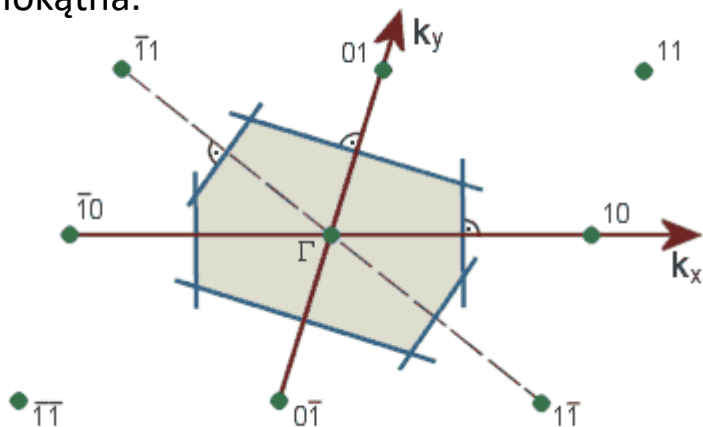
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

Strefa Brillouina w przestrzeni 1-wymiarowej



Strefa Brillouina w przestrzeni 2-wymiarowej, sieć ukośnokątna.



Strefa Brillouina dla sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej (fcc). Ograniczające strefę ściany kwadratowe i sześciokątne pochodzą, odpowiednio, od punktów sieci odwrotnej typu $(2,0,0)$ i $(1,1,1)$.

Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3,$$

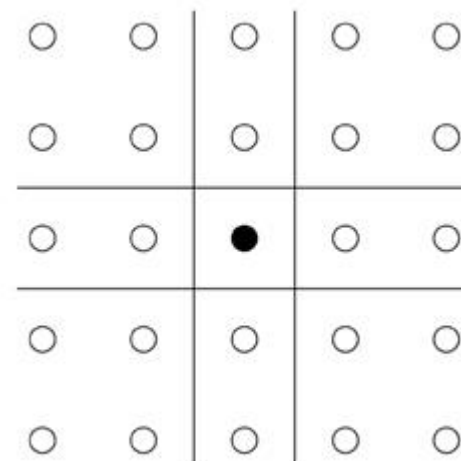
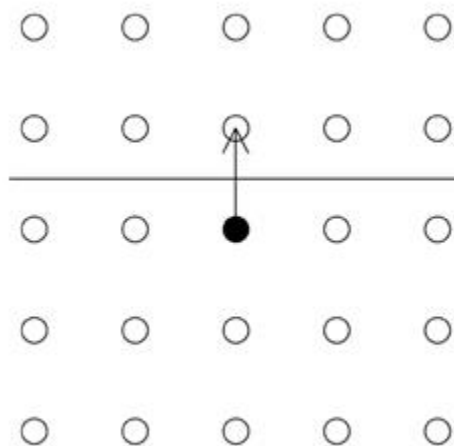
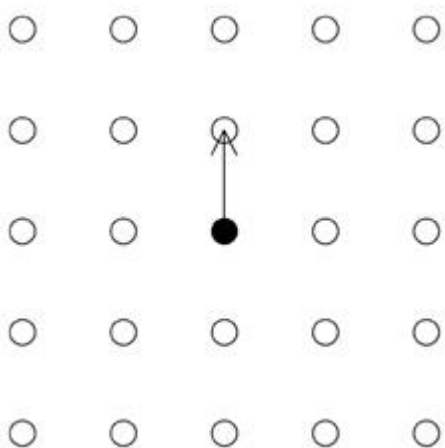
$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*,$$

$$n_i \in \mathbb{Z}$$

$$m_i \in \mathbb{Z}$$

Konstrukcja stref Brillouina w dwuwymiarowej, kwadratowej sieci odwrotnej

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



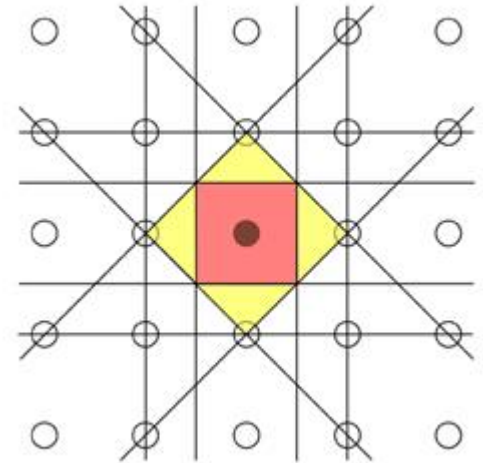
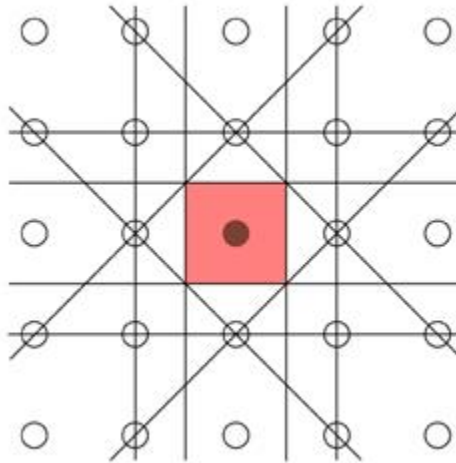
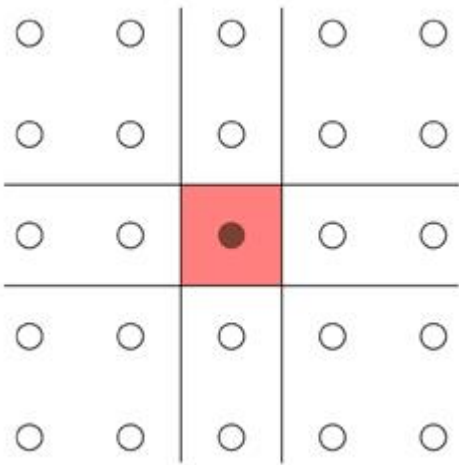
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

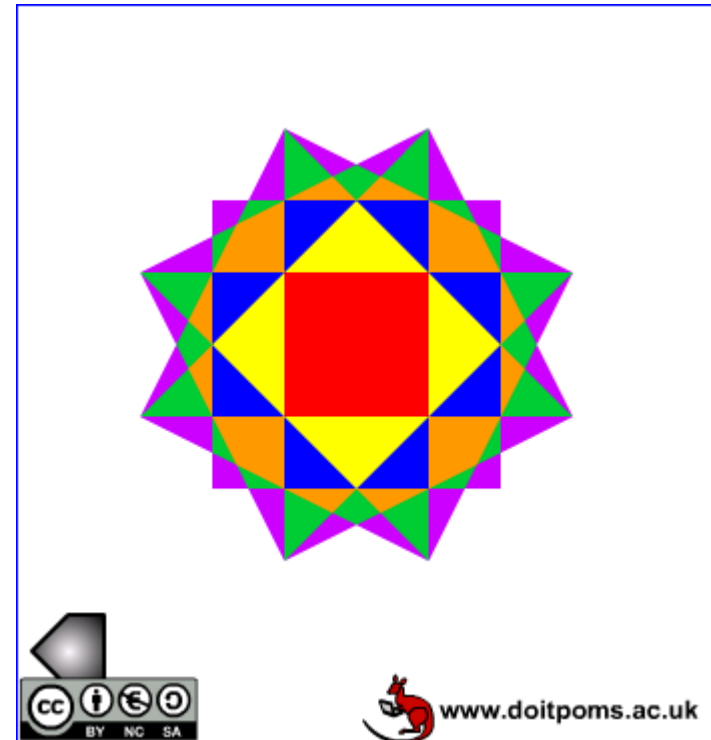
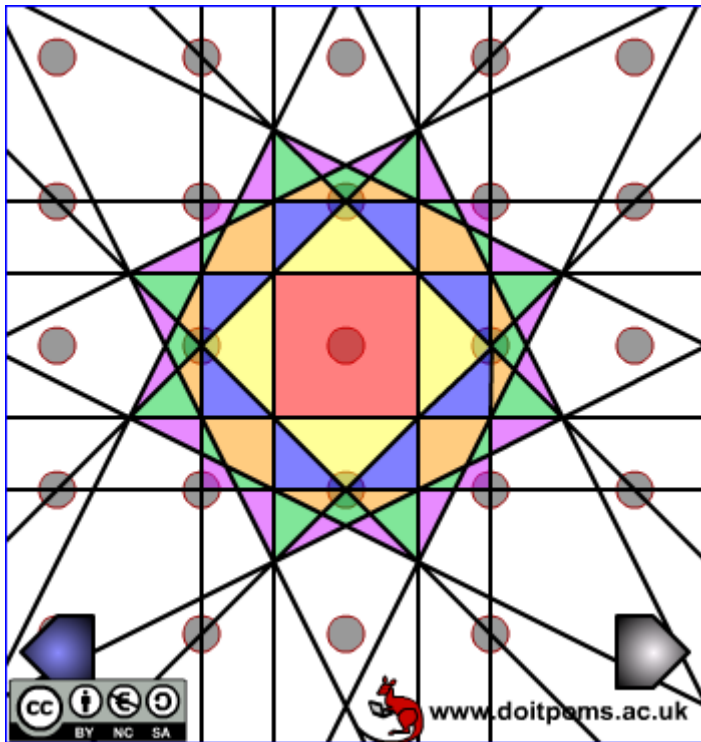
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

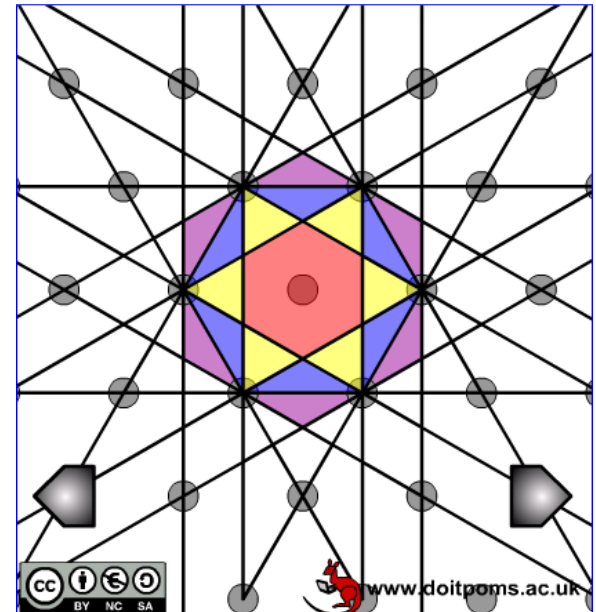
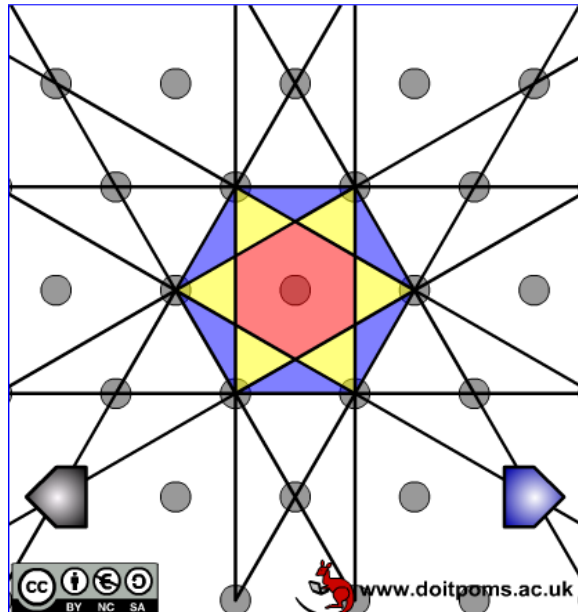
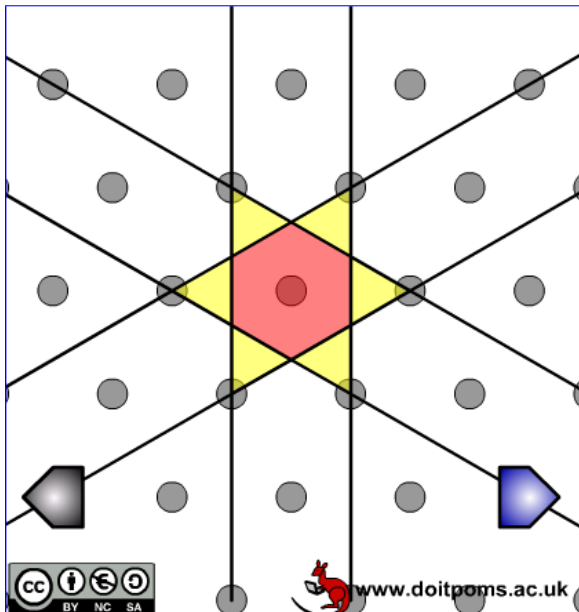
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

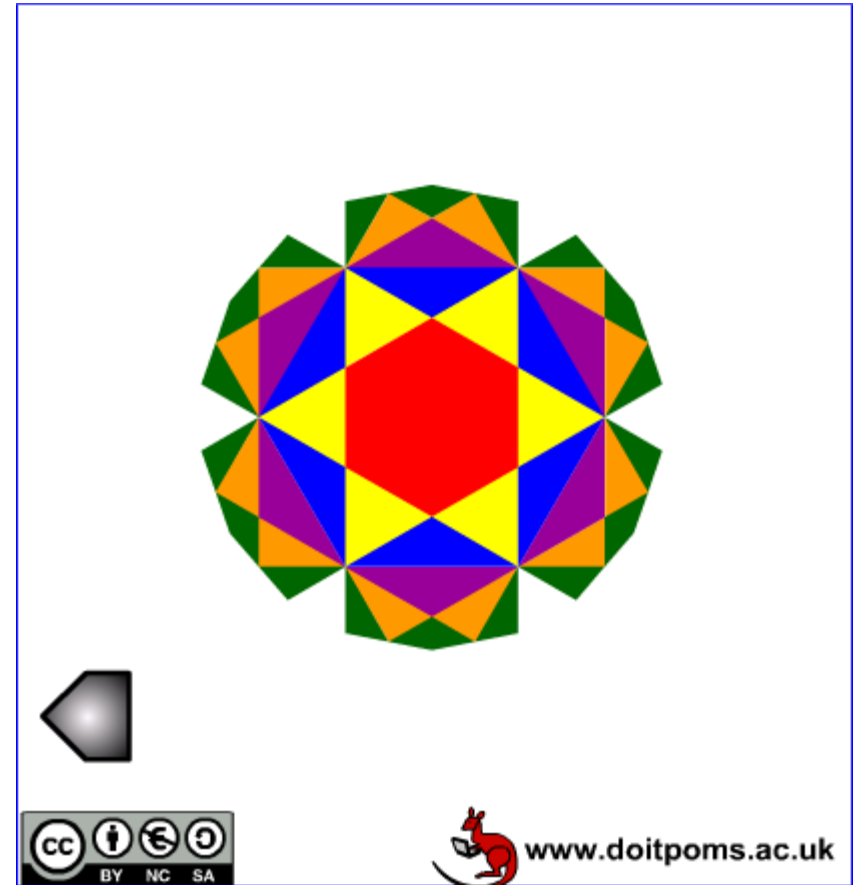
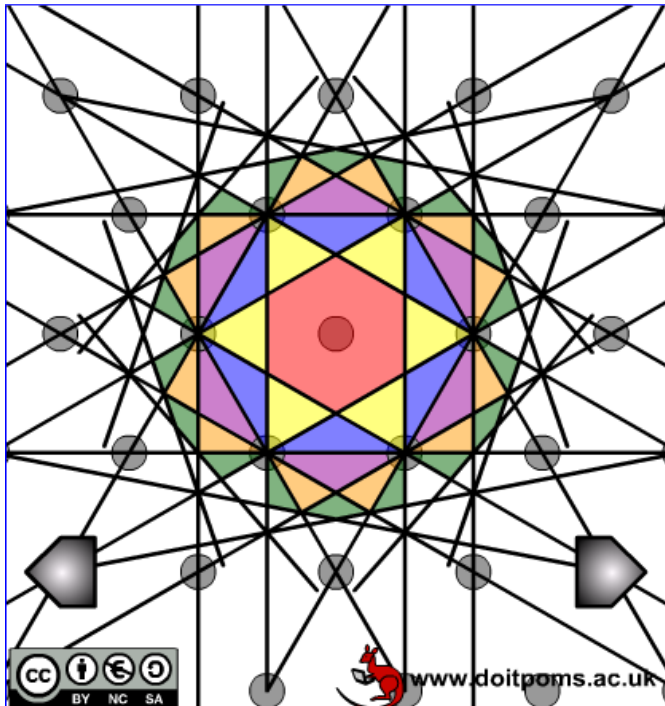
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

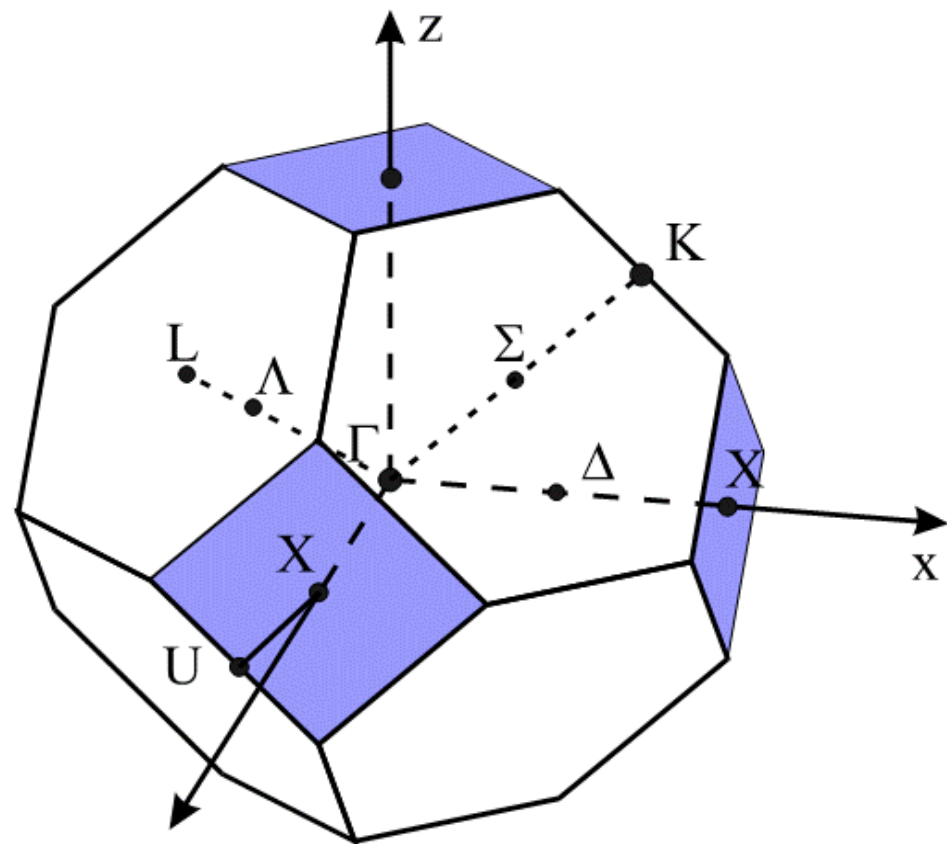
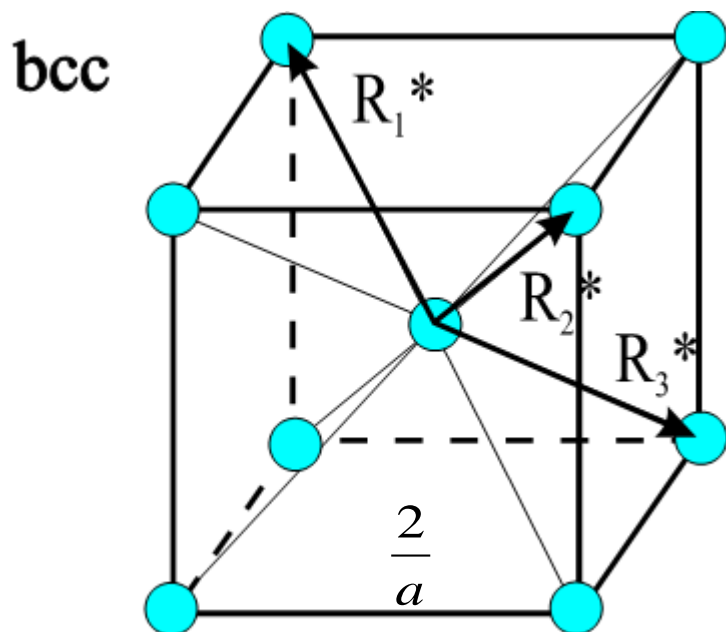


http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

Symetrie sieci odwrotnej

Sieć odwrotna do fcc to bcc

Komórka Vignera-Seitza



R. Stępniewski

Potencjał periodyczny

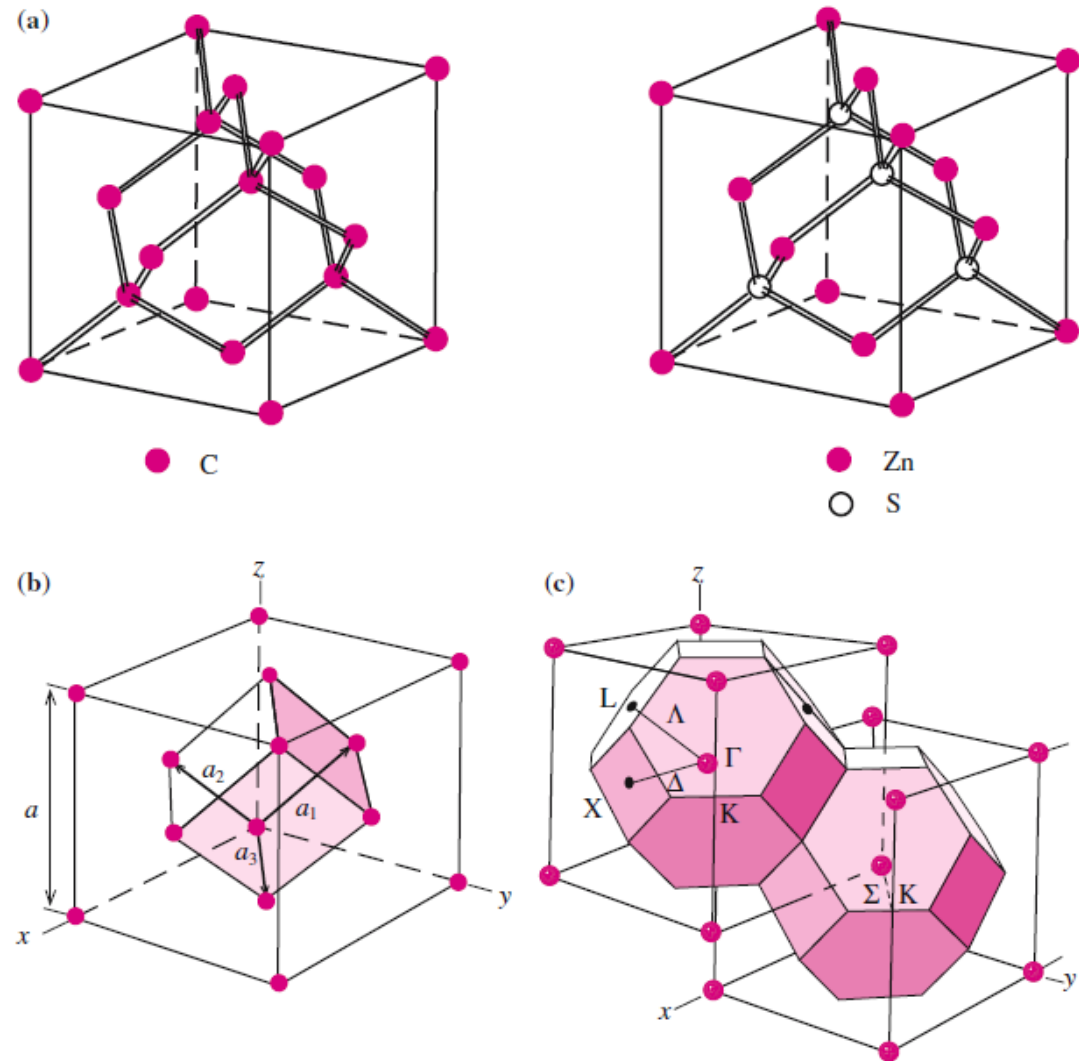


Fig. 2.2. (a) The crystal structure of diamond and zinc-blende (ZnS). (b) the fcc lattice showing a set of primitive lattice vectors. (c) The reciprocal lattice of the fcc lattice shown with the first Brillouin zone. Special high-symmetry points are denoted by Γ , X , and L , while high-symmetry lines joining some of these points are labeled as Λ and Δ

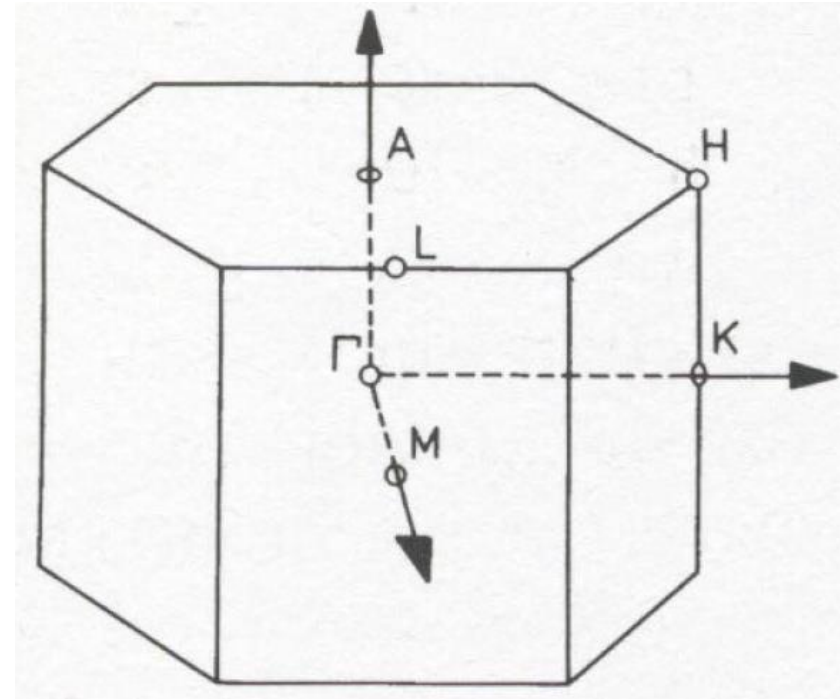
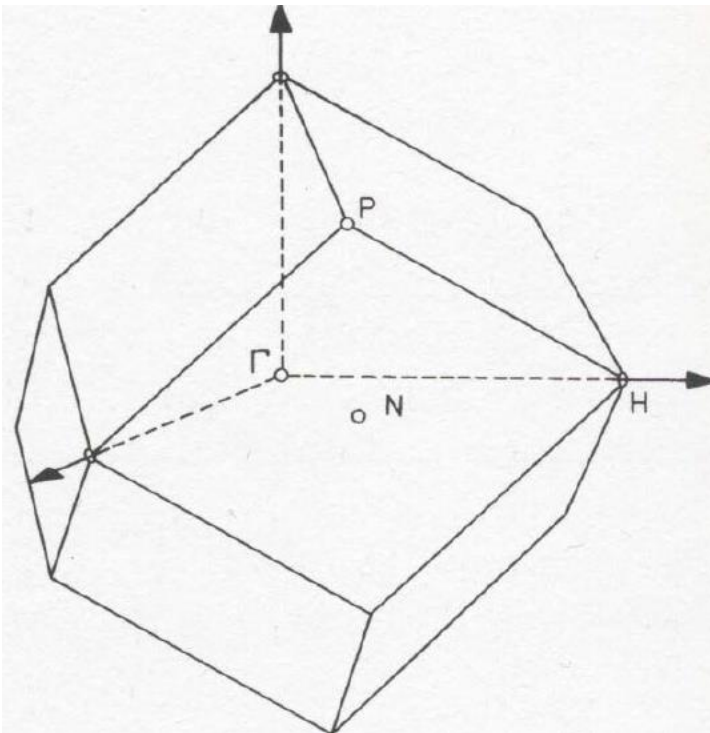
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

Struktura *bcc*



Struktura *heksagonalna*

Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

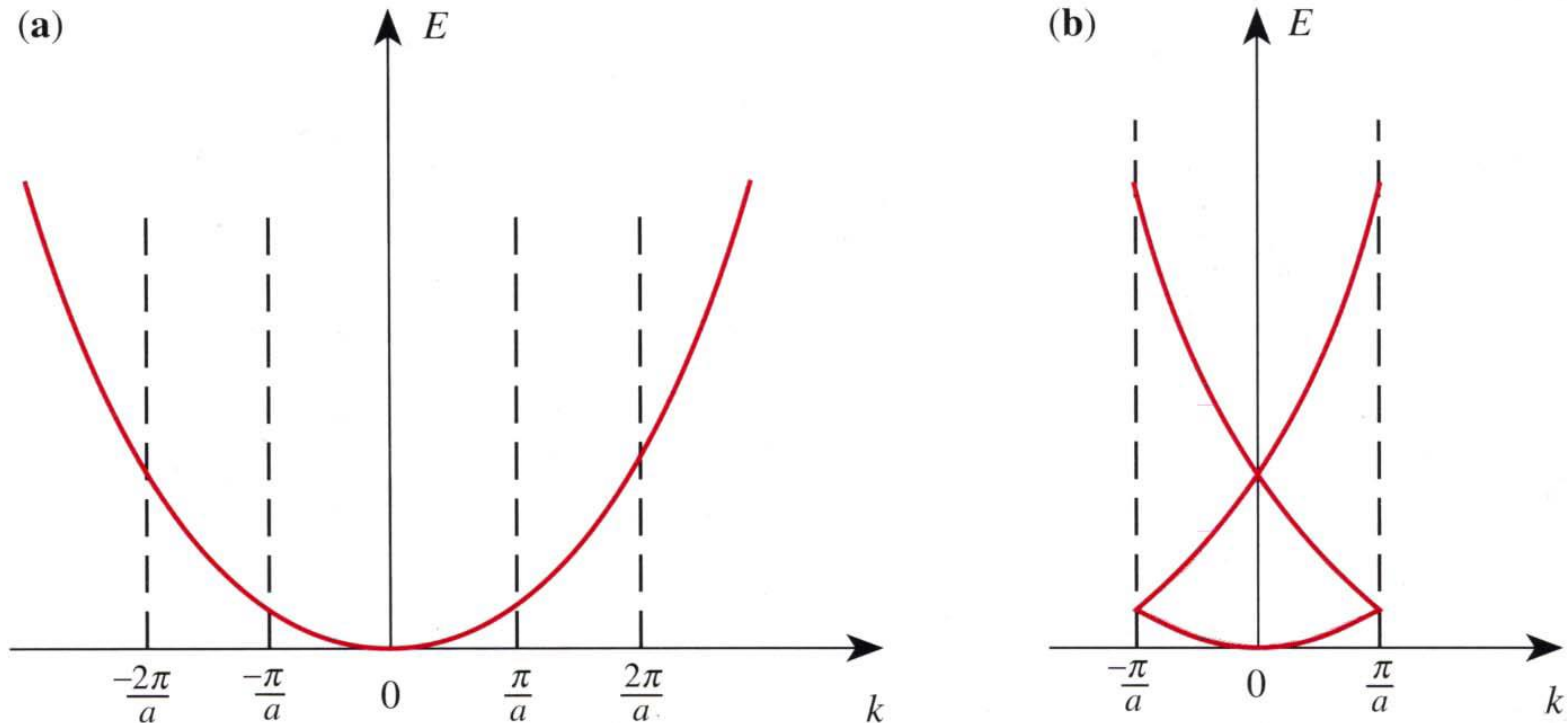


Fig. 2.1. The band structure of a free particle shown in (a) the extended zone scheme and (b) the reduced zone scheme

P. Y. Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors

Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

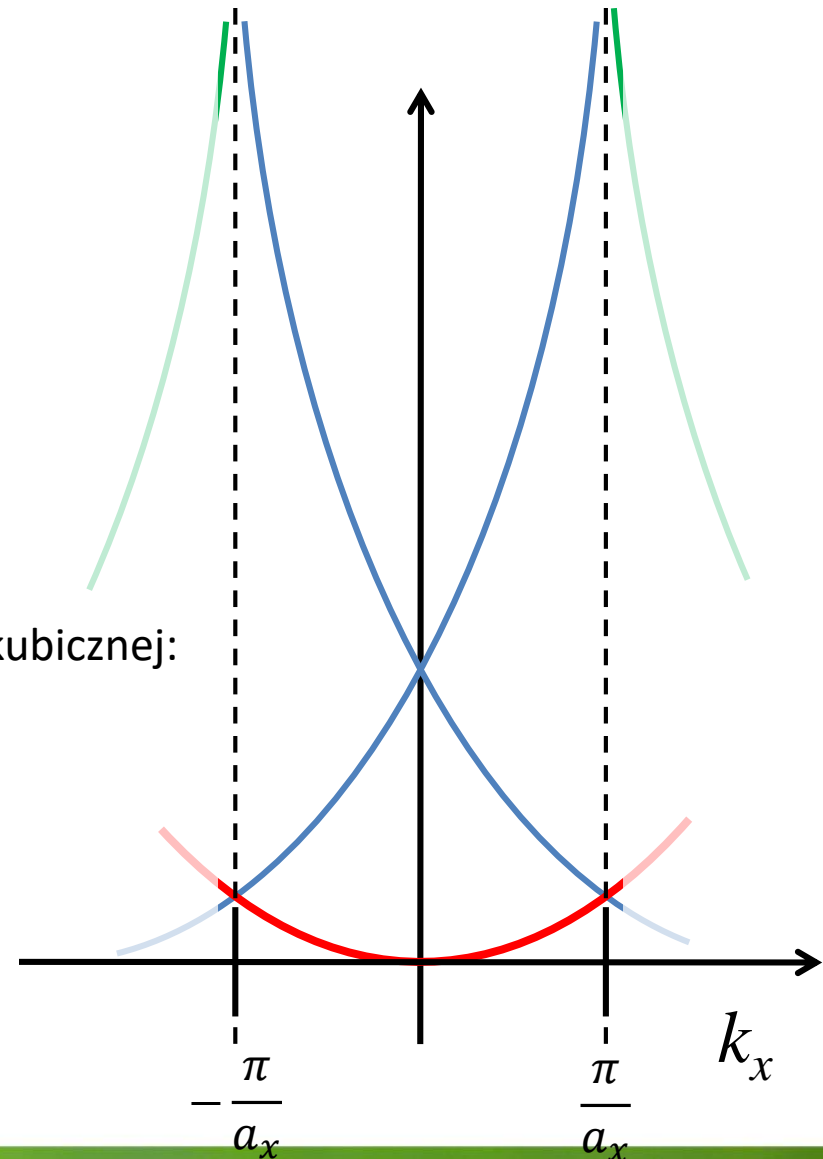
$$|g_i| = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa swobodnych elektronów w sieci kubicznej:

$$[hkl] =$$

000,

$$100, \bar{1}00, 200, \bar{2}00,$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

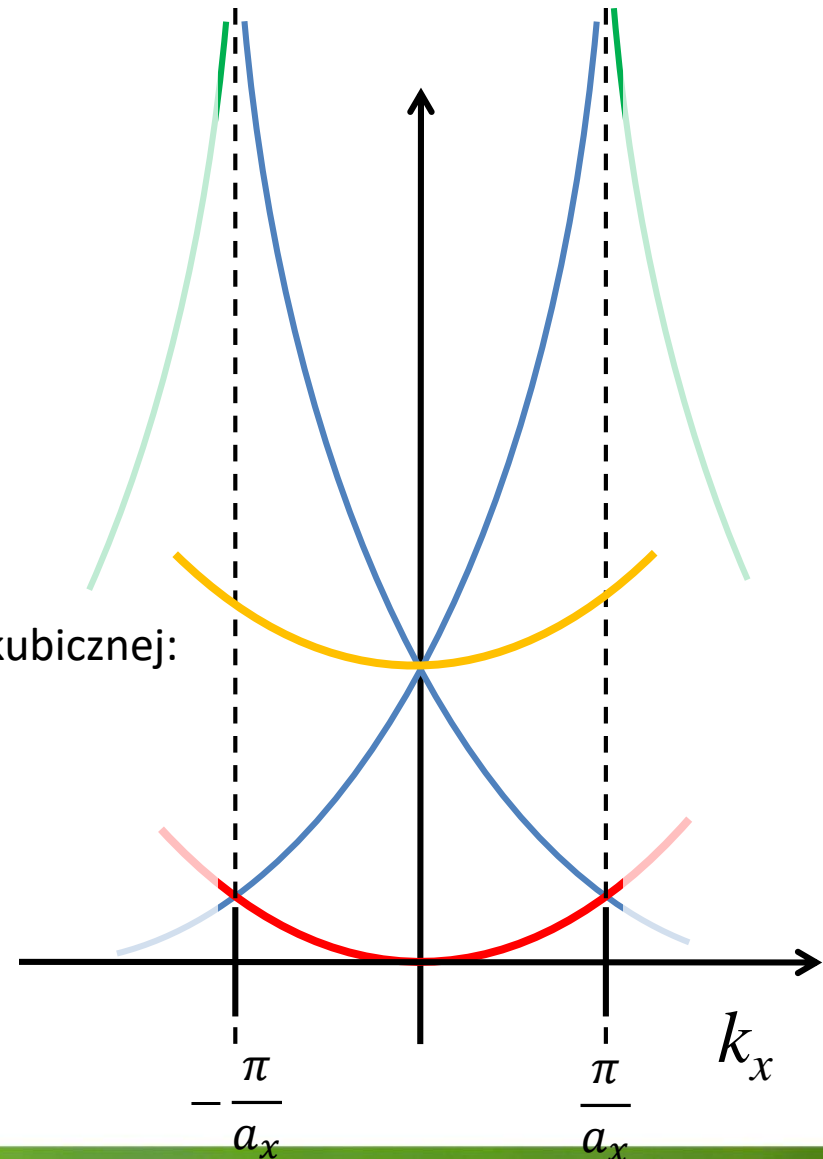
$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$|g_i| = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa swobodnych elektronów w sieci kubicznej:

$$[hkl] =$$

000,
100, $\bar{1}00$, 200, $\bar{2}00$,
010, 0 $\bar{1}0$, 001, 00 $\bar{1}$,



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

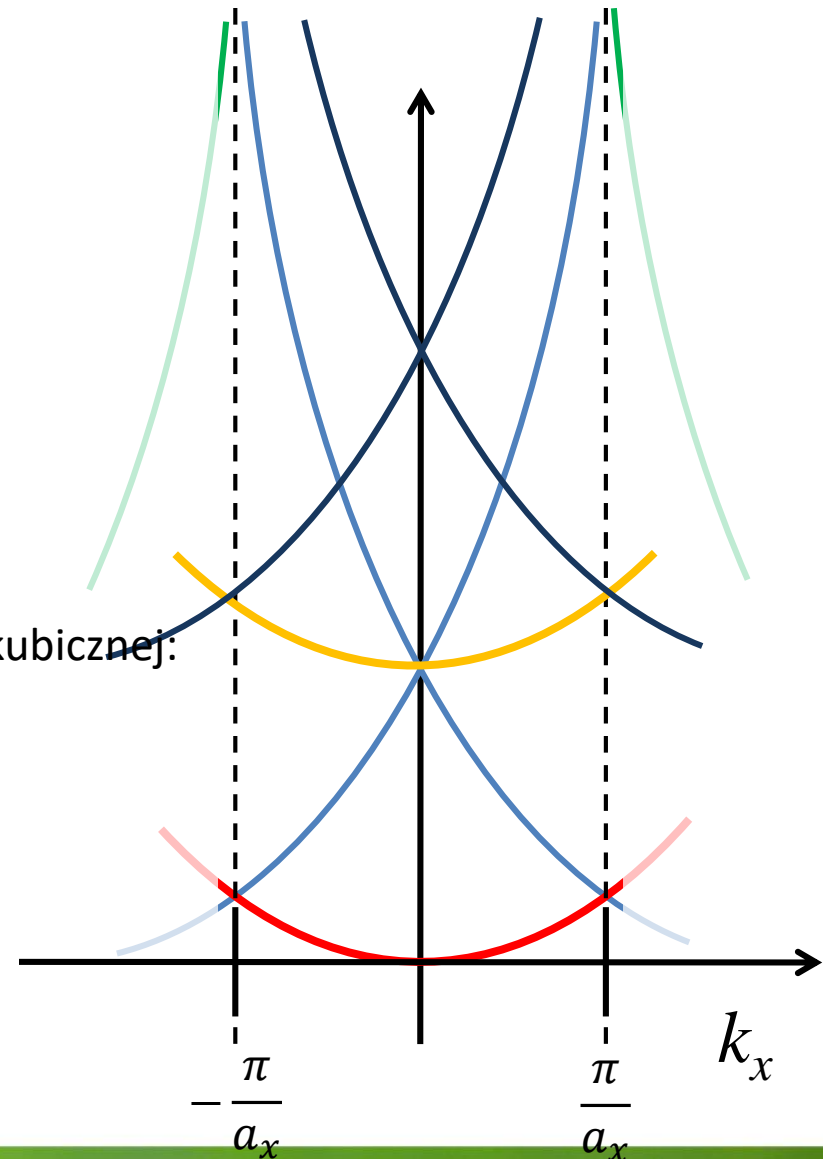
$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$|g_i| = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa swobodnych elektronów w sieci kubicznej:

$$[hkl] =$$

000,
100, $\bar{1}00$, 200, $\bar{2}00$,
010, 0 $\bar{1}0$, 001, 00 $\bar{1}$,
110, 101, 1 $\bar{1}0$, 10 $\bar{1}$, $\bar{1}01$, $\bar{1}\bar{1}0$, $\bar{1}0\bar{1}$, $\bar{1}\bar{1}0$

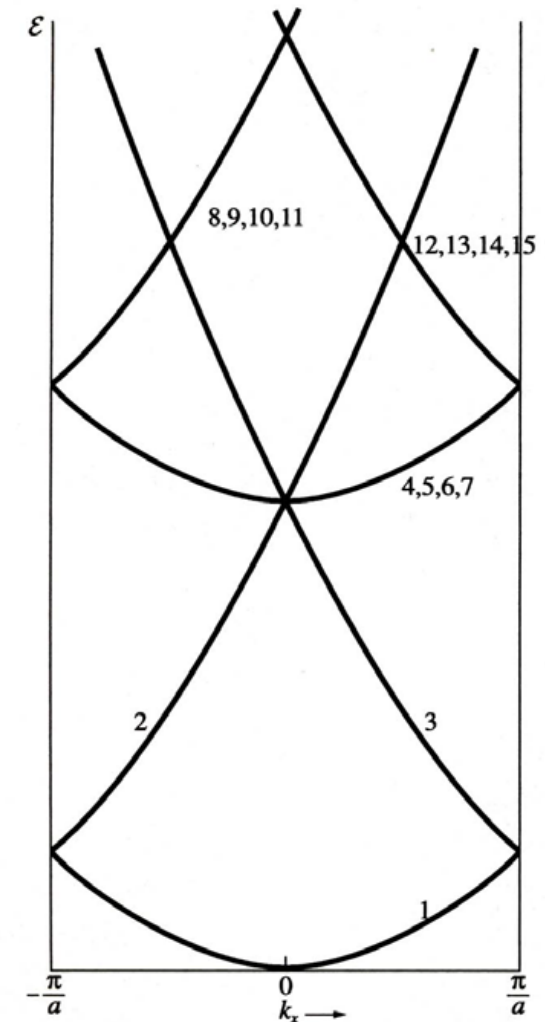


Model pustej sieci

Model prawie swobodnych elektronów

Pasmo	$Ga/2\pi$
1	000
2,3	100, $\bar{1}00$
4,5,6,7	010, $0\bar{1}0$, 001, $00\bar{1}$
8,9,10,11	110, 101, $1\bar{1}0$, $10\bar{1}$
12,13,14,15	$\bar{1}10$, $\bar{1}01$, $\bar{1}\bar{1}0$, $\bar{1}0\bar{1}$
16,17,18,19	011, $0\bar{1}1$, $01\bar{1}$, $0\bar{1}\bar{1}$

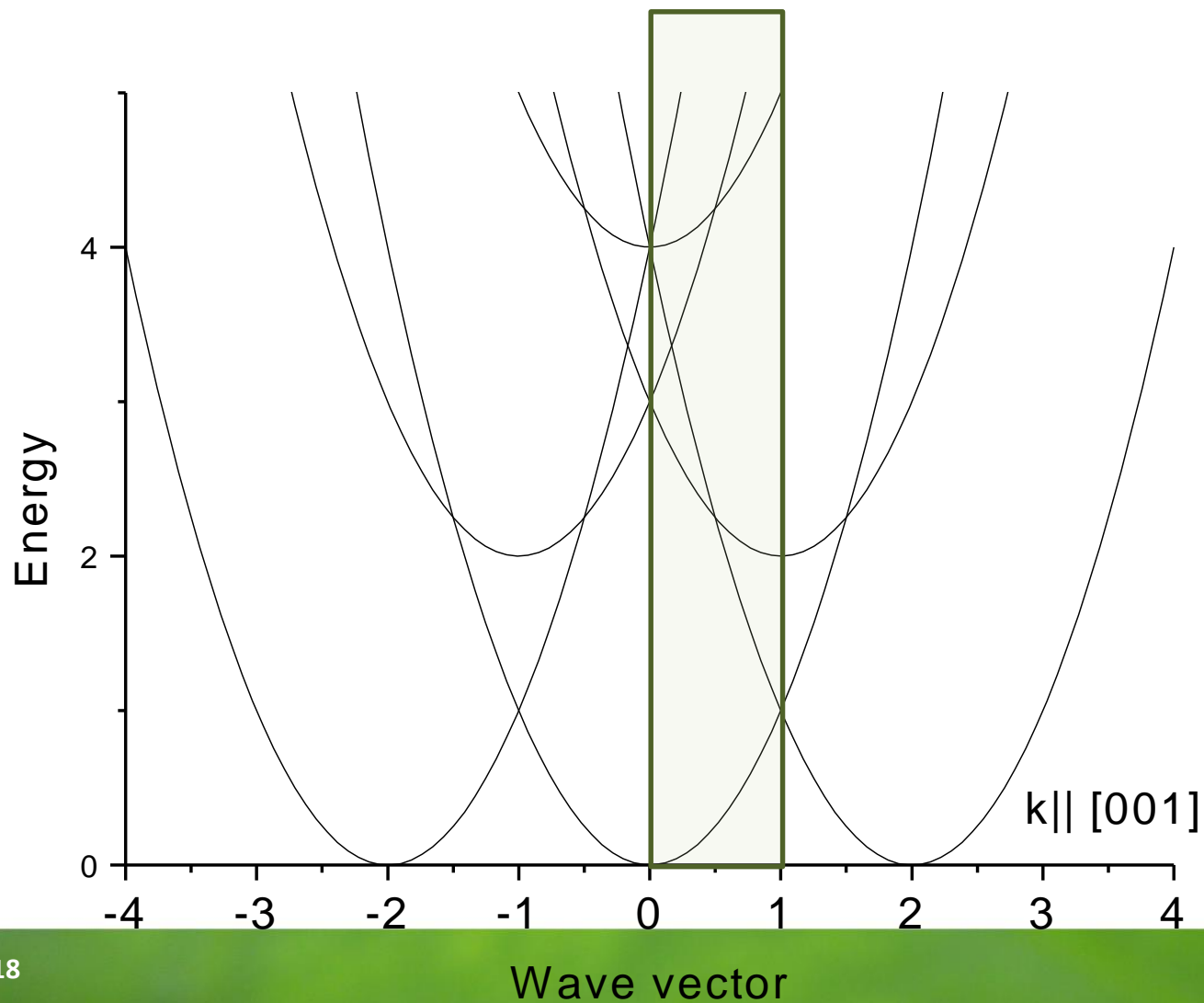
$\mathcal{E}(000)$	$\mathcal{E}(k_x, 00)$
0	k_x^2
$(2\pi/a)^2$	$(k_x \pm 2\pi/a)^2$
$(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + (2\pi/a)^2$
$2(2\pi/a)^2$	$(k_x + 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
$2(2\pi/a)^2$	$(k_x - 2\pi/a)^2 + (2\pi/a)^2$
$2(2\pi/a)^2$	$k_x^2 + 2(2\pi/a)^2$



Ch. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego

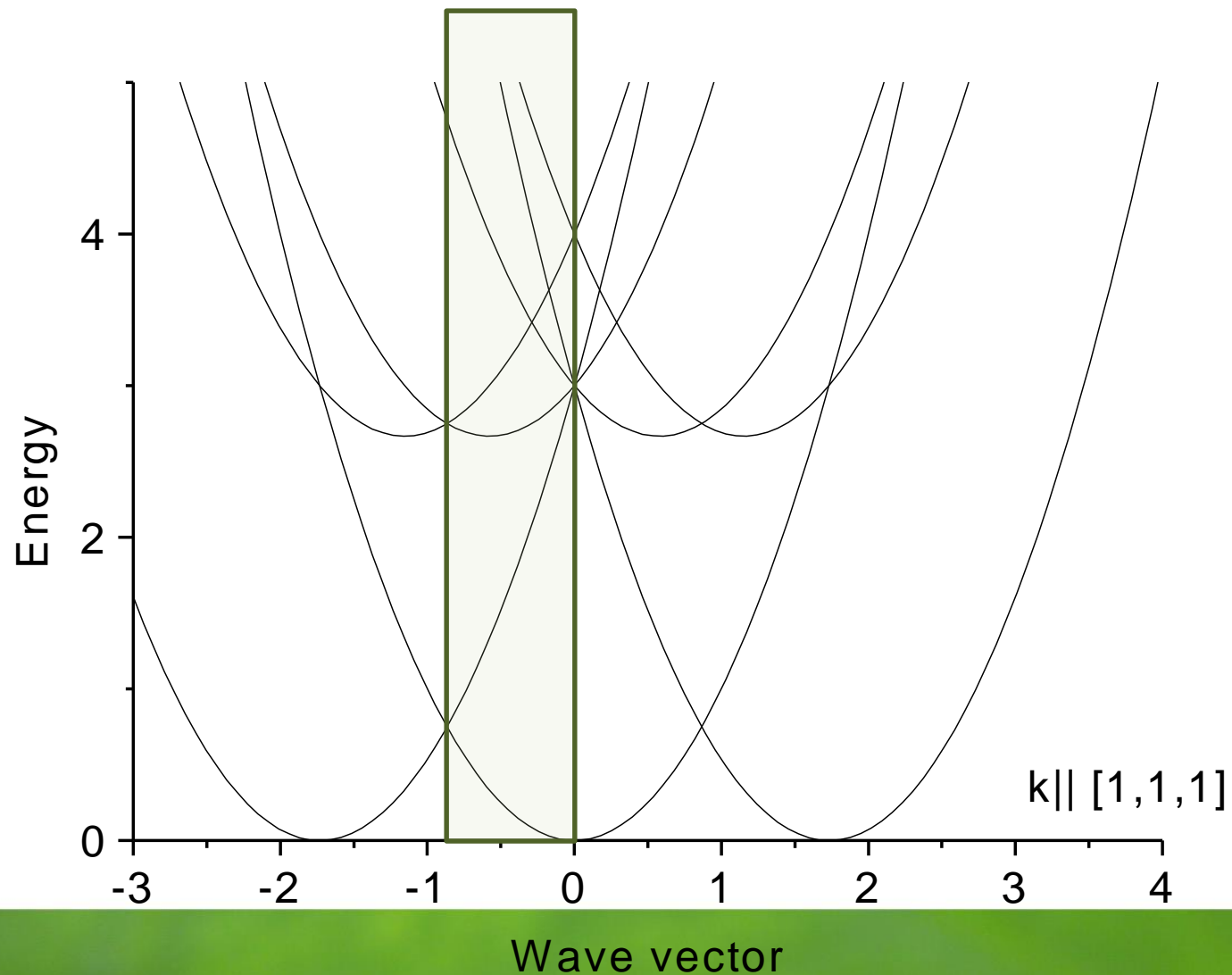
Model pustej sieci

Kierunek $[001]$ X



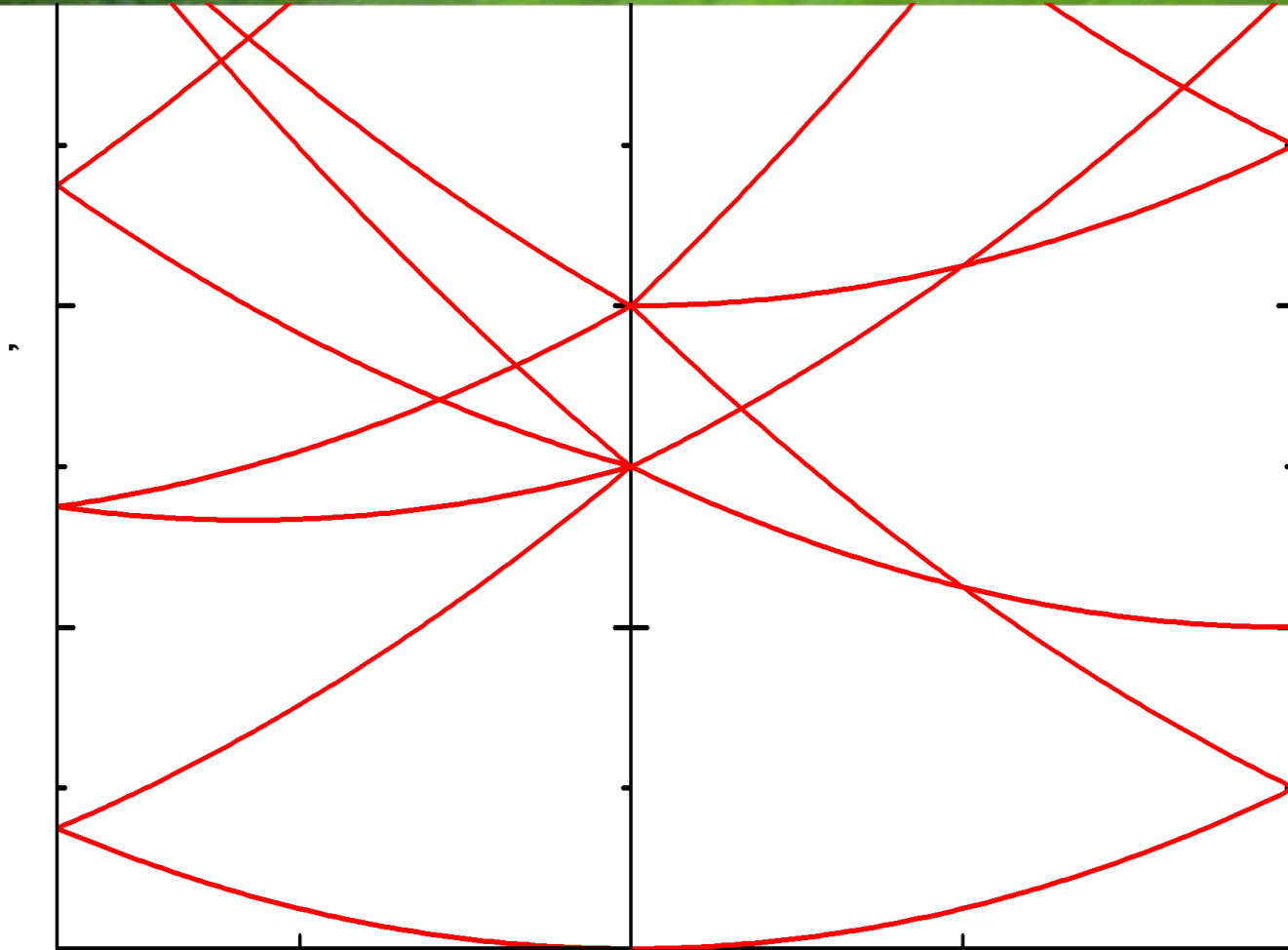
Model pustej sieci

Kierunek $[111]$ L



L

Model pustej sieci

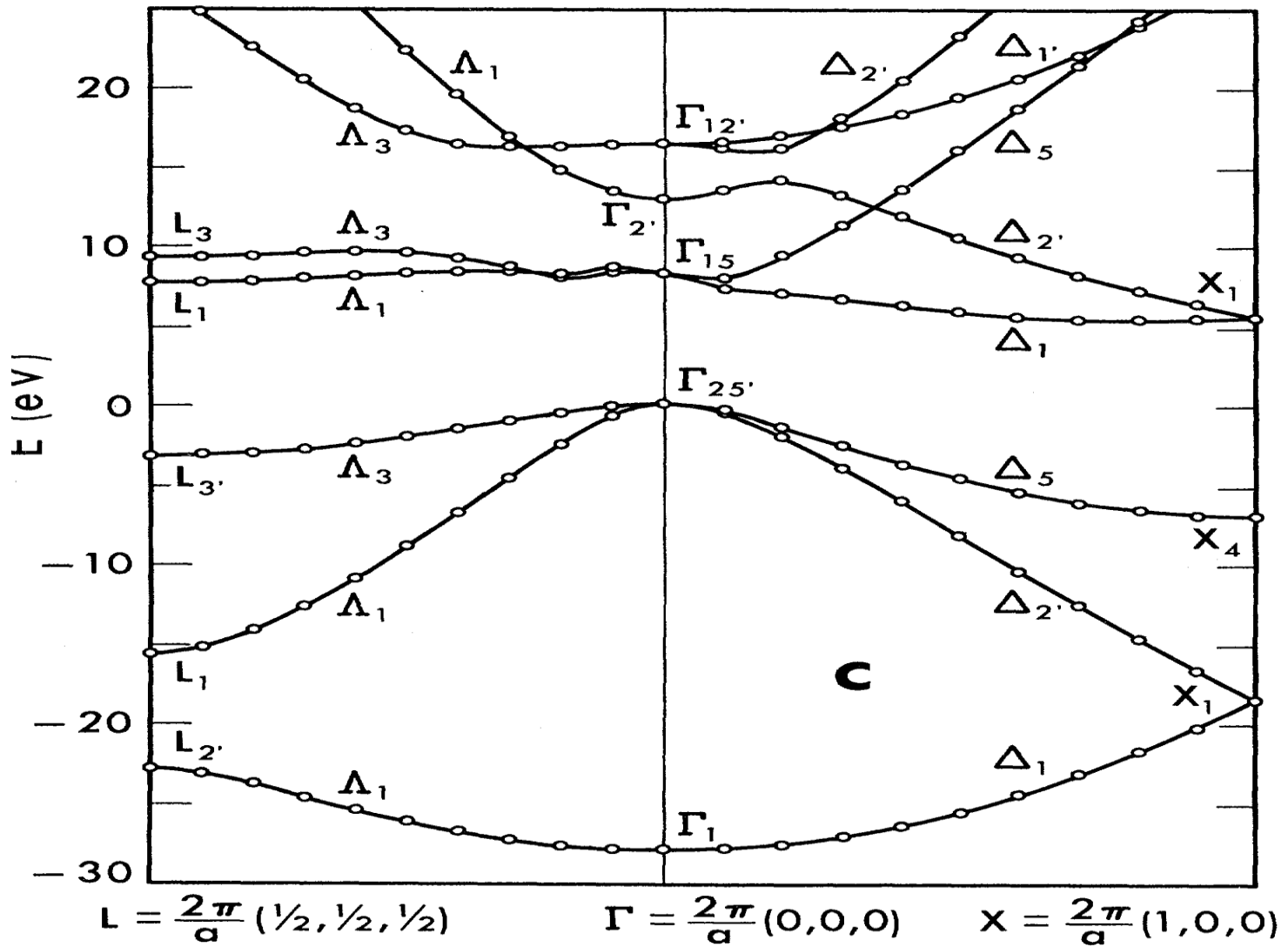


$$L = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{a} (0, 0, 0)$$

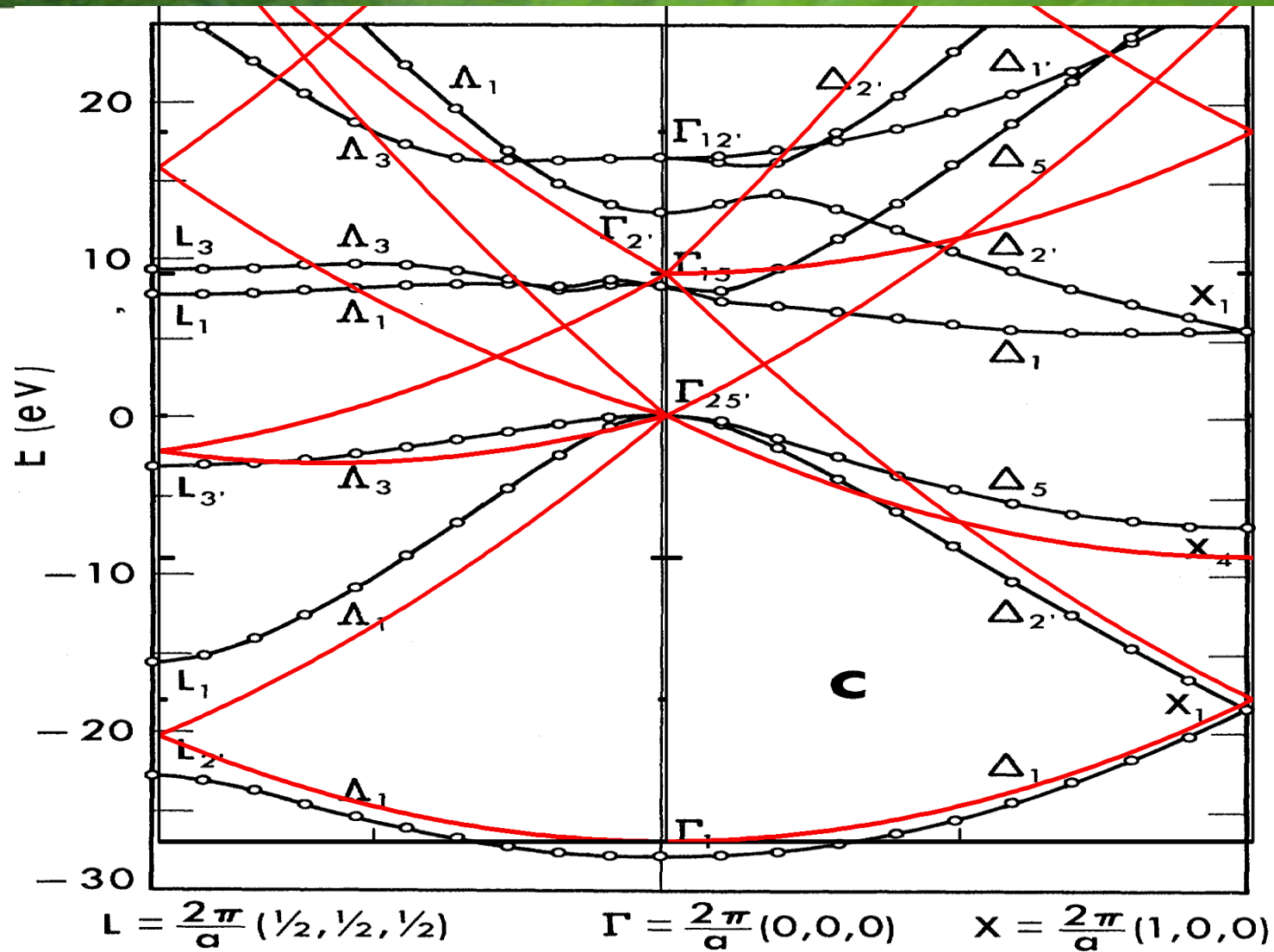
$$X = \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0)$$

Model pustej sieci



Stepniewski

Model pustej sieci



Metoda ciasnego wiązania - wnioski

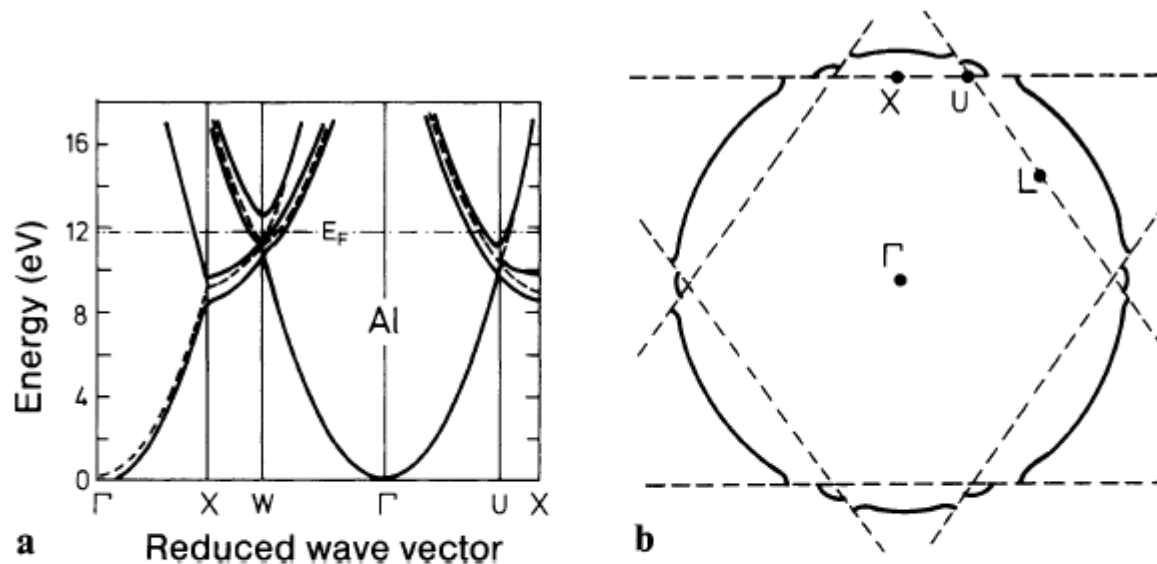


Fig. 7.11. (a) Theoretical bandstructure $E(k)$ for Al along directions of high symmetry (Γ is the center of the Brillouin zone). The dotted lines are the energy bands that one would obtain if the s - and p -electrons in Al were completely free ("empty" lattice). After [7.3]. (b) Cross section through the Brillouin zone of Al. The zone edges are indicated by the dashed lines. The Fermi "sphere" of Al (—) extends beyond the edges of the first Brillouin zone

Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

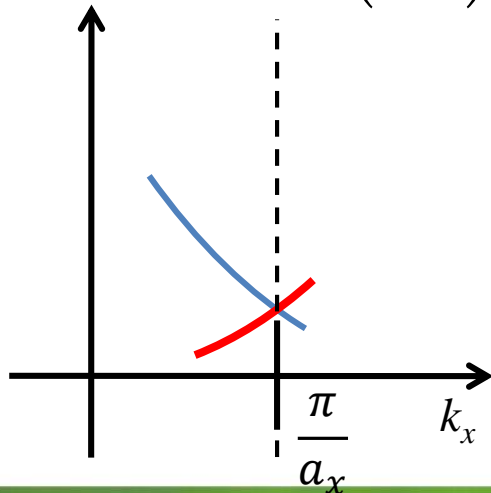
Założmy zaburzenie w postaci „małego” potencjału

$$V(x) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (1D)$$

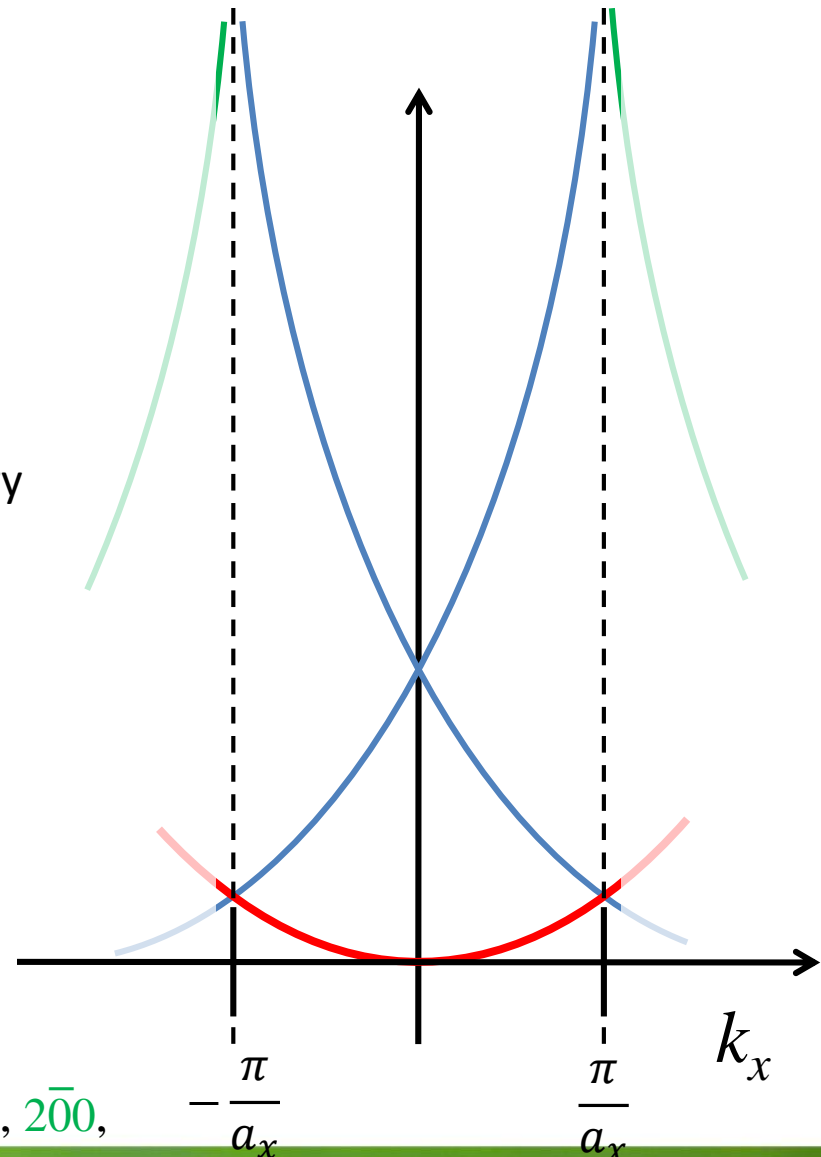
„mały potencjał”

Mały potencjał ma wpływ na pasma na granicach sfery Brillouina

$$V(x) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = \frac{V_0}{2} \left(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x} \right)$$



$$hkl = 000, 100, 1\bar{0}0, 200, 2\bar{0}0,$$



Potencjał periodyczny

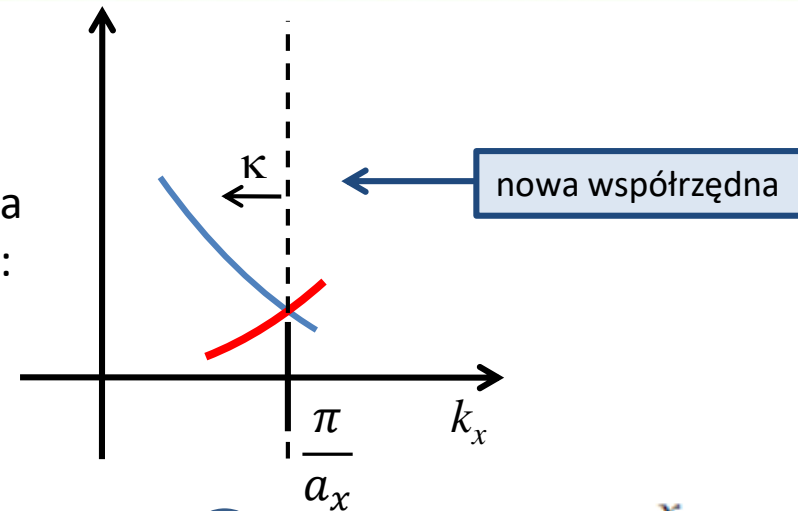
Twierdzenie Blocha

Opis stanów elektronowych na granicy strefy Brillouina wymaga superpozycji co najmniej dwóch fal płaskich. Dla znikającego (ale niezerowego) potencjału falami tymi są:

$$\psi_{1,\kappa}(x) \sim e^{i\frac{G}{2}x} \quad \psi_{2,\kappa}(x) \sim e^{i\left(\frac{G}{2}-G\right)x} = e^{-i\frac{G}{2}x}$$

$$\psi_+ \sim \left(e^{-i\frac{G}{2}x} + e^{+i\frac{G}{2}x} \right) \sim \cos \frac{\pi}{a} x$$

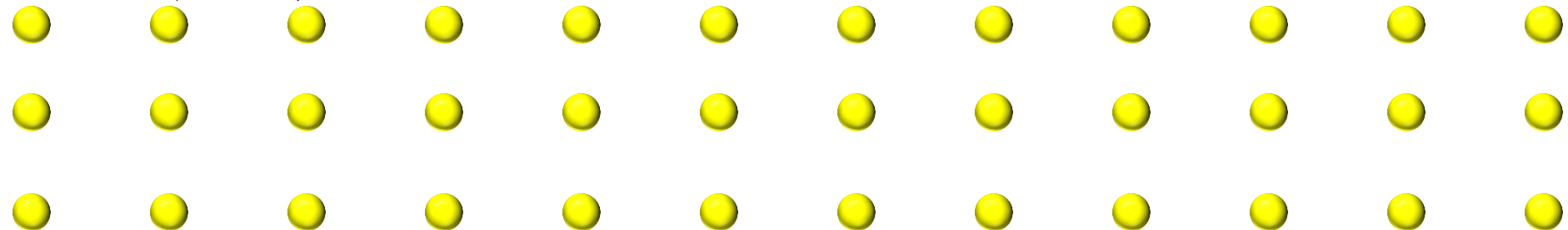
$$\psi_- \sim \left(e^{-i\frac{G}{2}x} - e^{+i\frac{G}{2}x} \right) \sim \sin \frac{\pi}{a} x$$



gęstość prawdopodobieństwa: $\rho_+ = \psi_+^* \psi_+ \sim \cos^2 \pi \frac{x}{a}$,

gęstość prawdopodobieństwa: $\rho_- = \psi_-^* \psi_- \sim \sin^2 \pi \frac{x}{a}$,

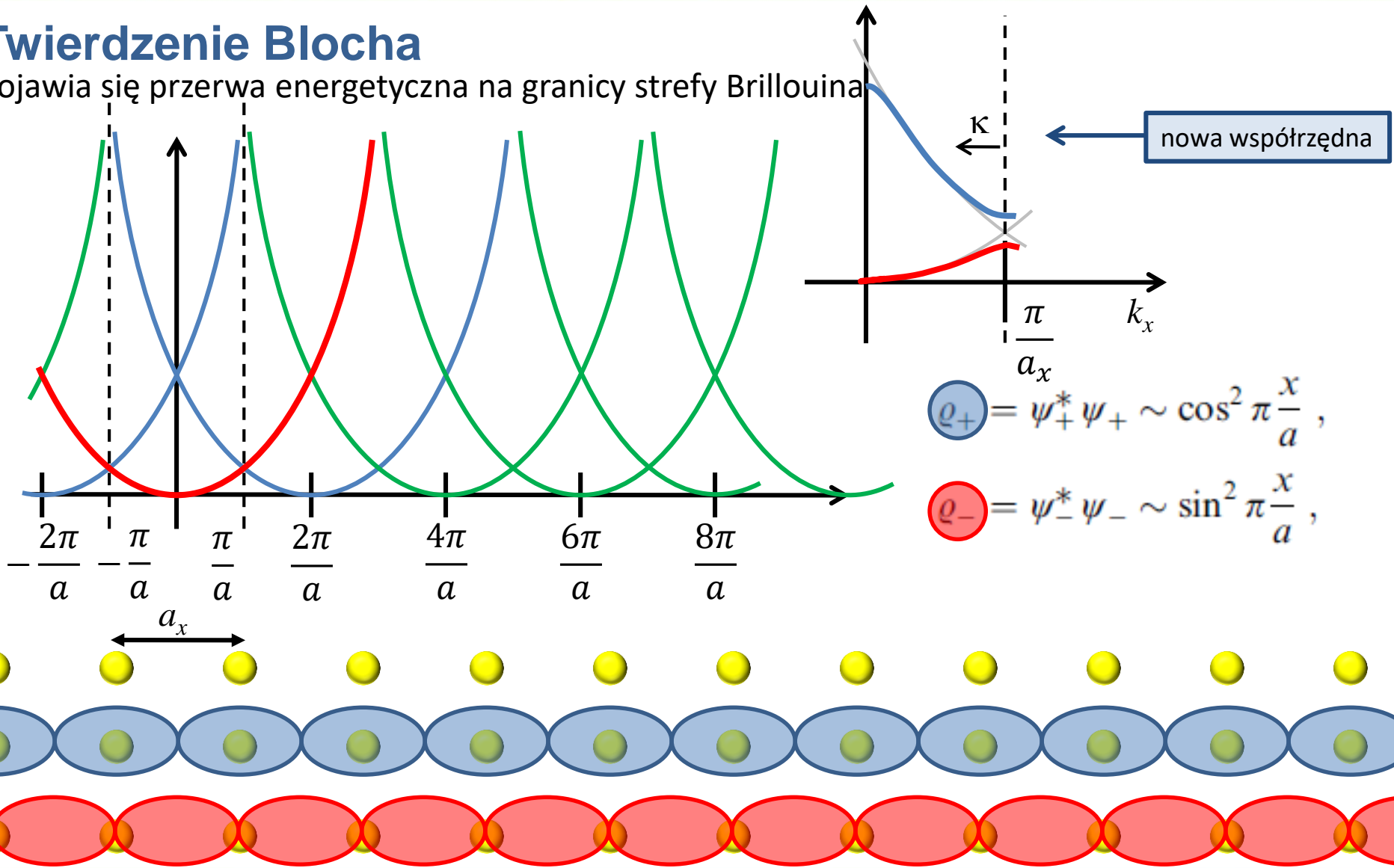
Rozwiązanie odpowiada dwóm falom o tej samej długości:



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

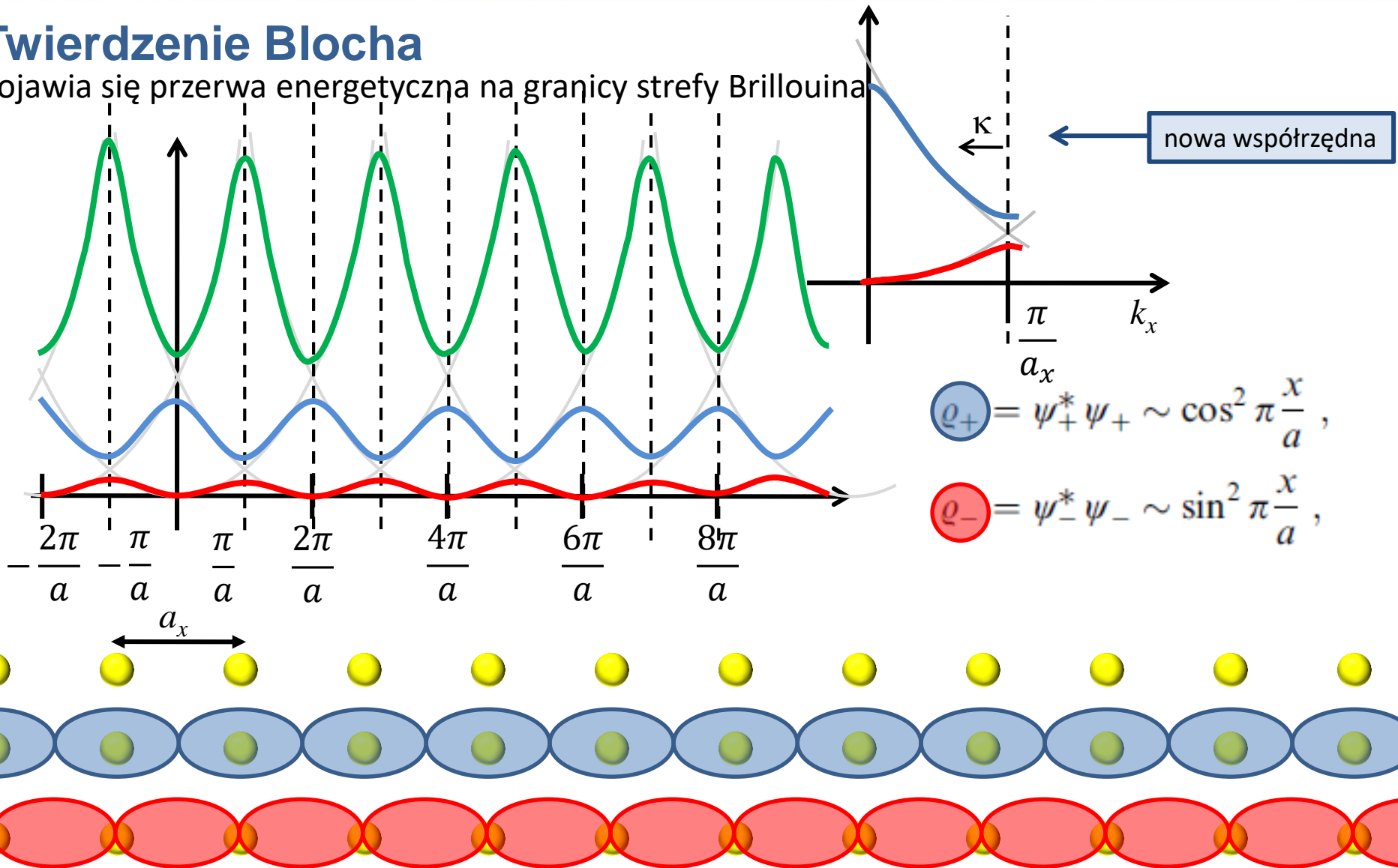
Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

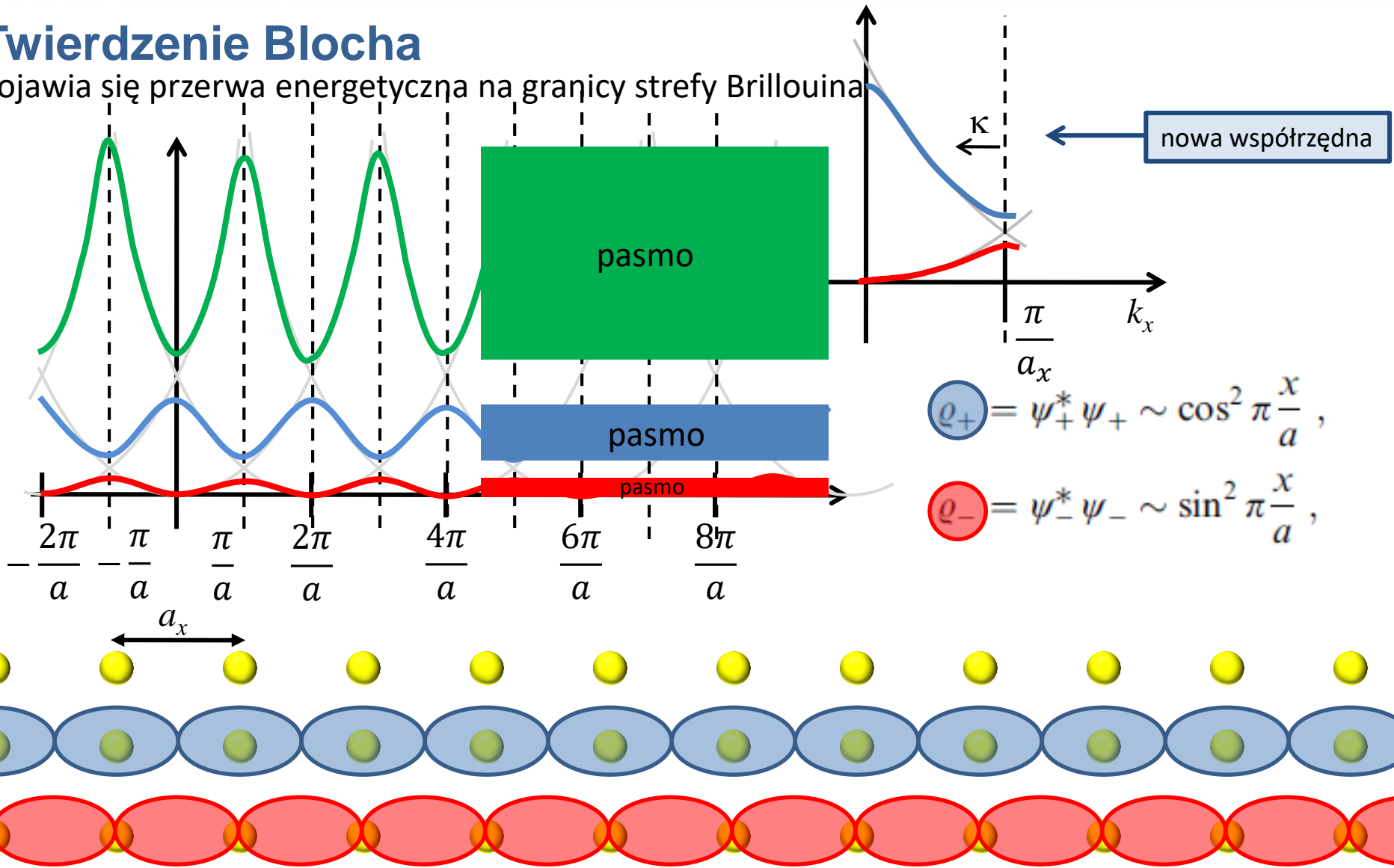
Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



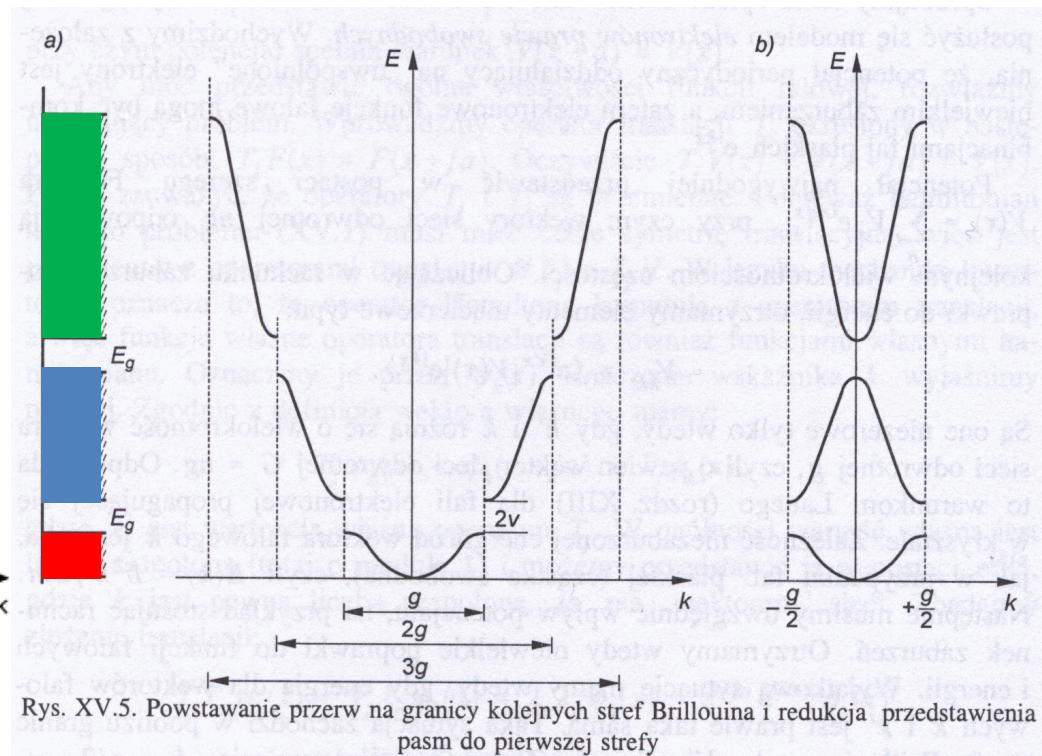
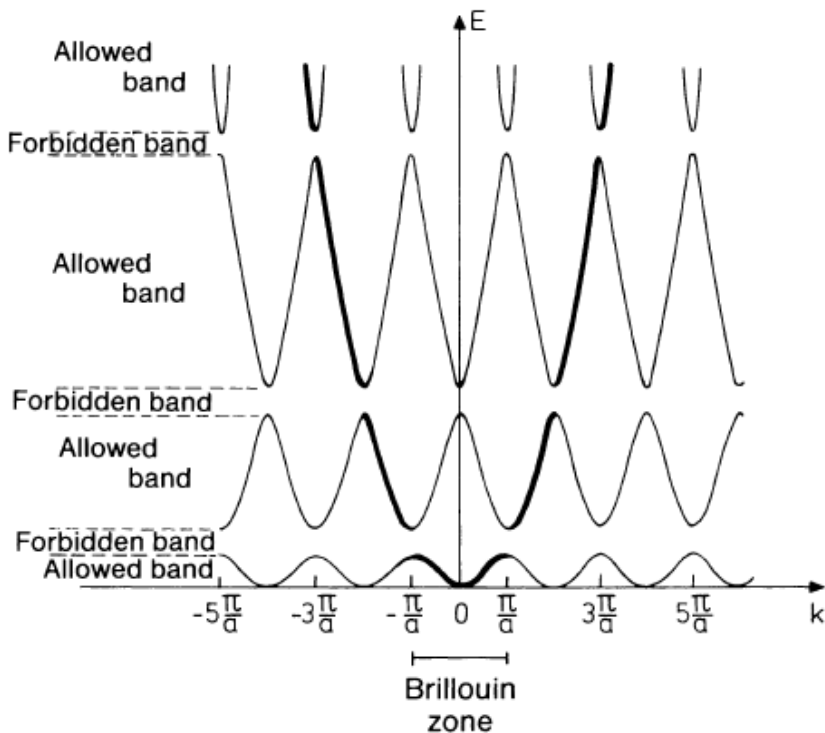
$$\rho_+ = \psi_+^* \psi_+ \sim \cos^2 \pi \frac{x}{a},$$

$$\rho_- = \psi_-^* \psi_- \sim \sin^2 \pi \frac{x}{a},$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

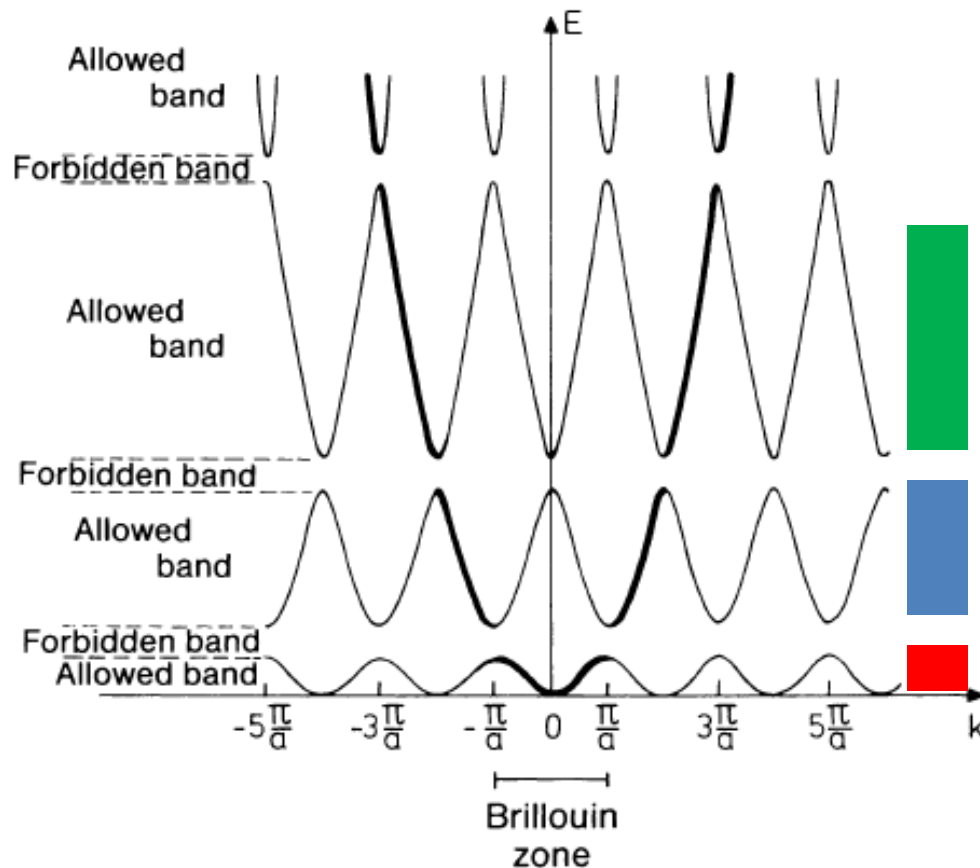
- Ponieważ funkcja Blocha przesunięta o wektor sieci odwrotnej nie zmienia się to wygodnie jest przedstawiać wyniki tylko w I -szej strefie Brillouina. Trzeba wówczas numerować pasma energetyczne.
- Stan elektronu w ciele stałym zadany jest przez wektor falowy z I -szej strefy, numer pasma oraz rzut spinu.



Rys. XV.5. Powstawanie przerw na granicy kolejnych stref Brillouina i redukcja przedstawienia pasm do pierwszej strefy

Struktura pasmowa

- It is convenient to present the energies only in the 1st Brillouin zone.
- The electron state in the solid state is given by the wave vector of the 1st Brillouin zone, band number and a spin.



Struktura pasmowa

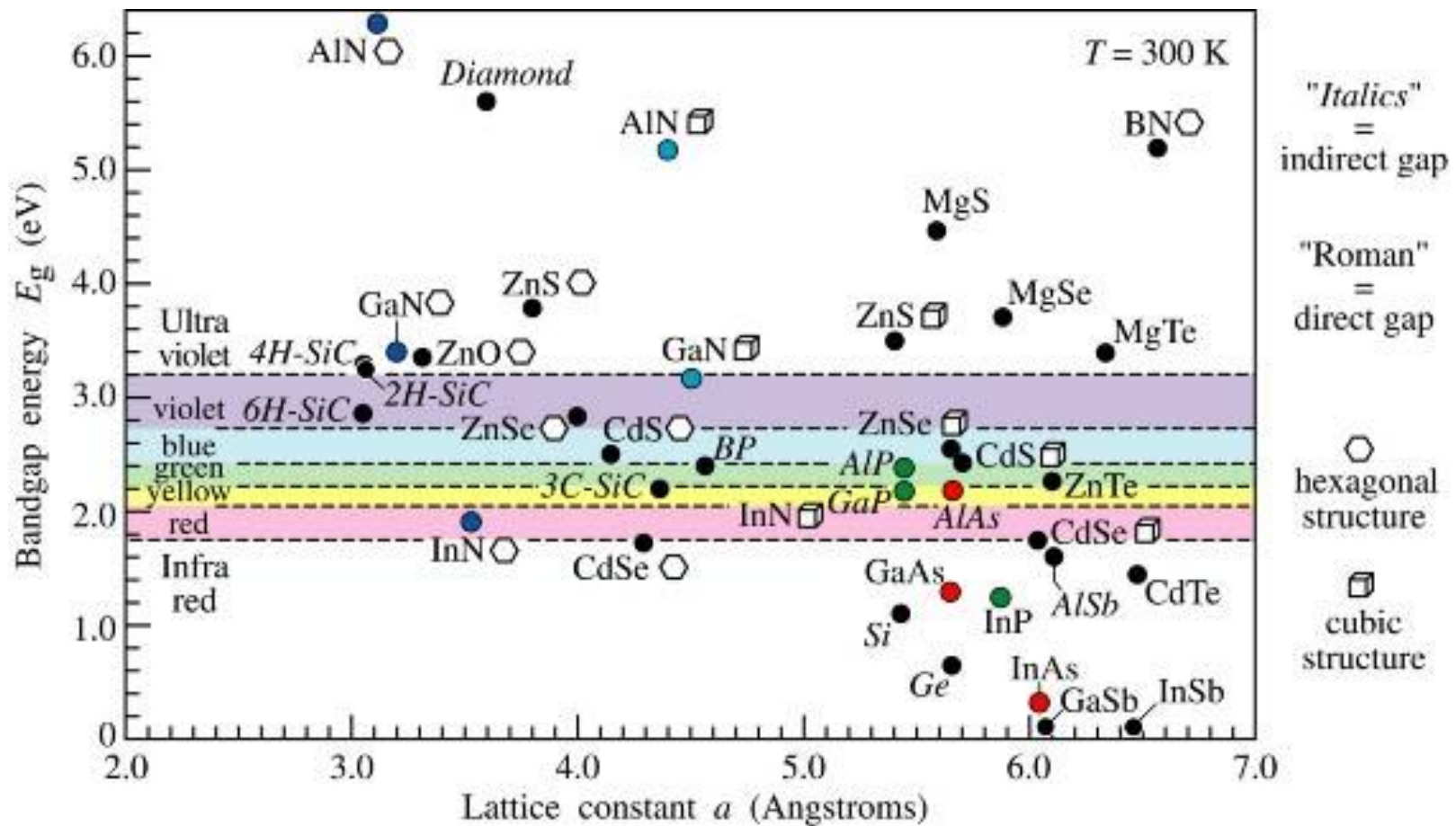
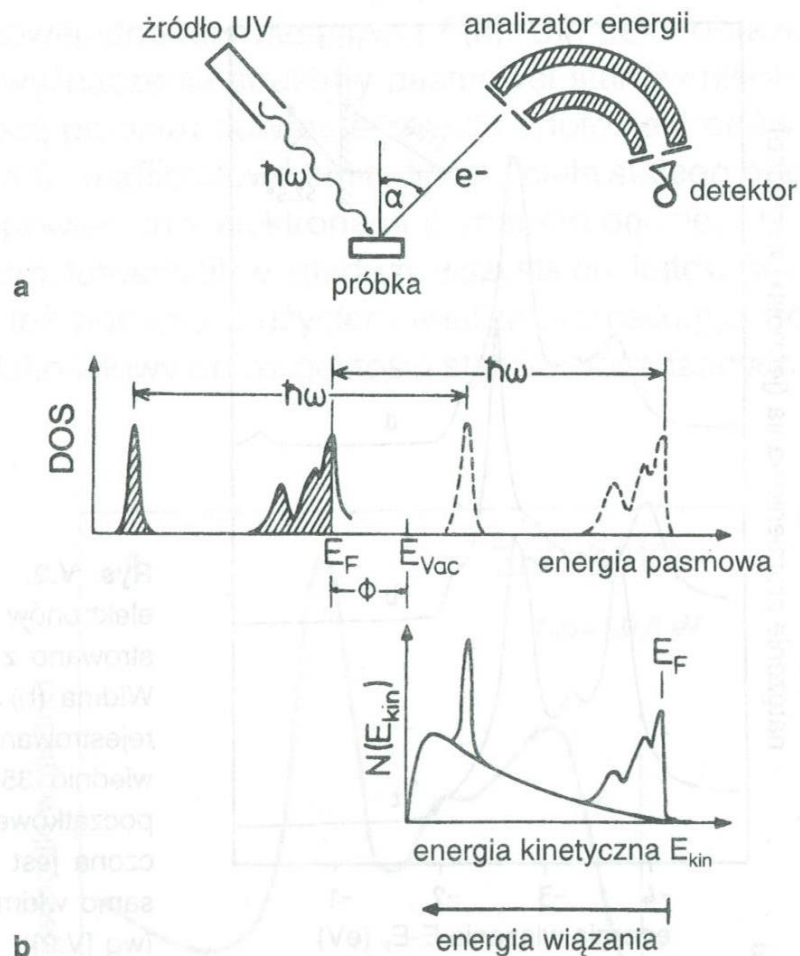


Fig. 11.4. Room-temperature bandgap energy versus lattice constant of common elemental and binary compound semiconductors.

Spektroskopia fotoemisyjna



$$\hbar\omega = \phi + E_{kin} + E_b$$

praca wyjścia bariera potencjału

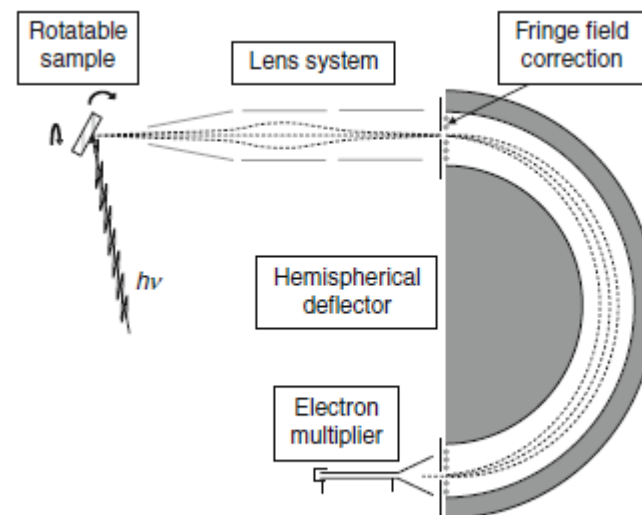


Fig. V.1. Experimental setup for photoemission spectroscopy

Spektroskopia fotoemisyjna

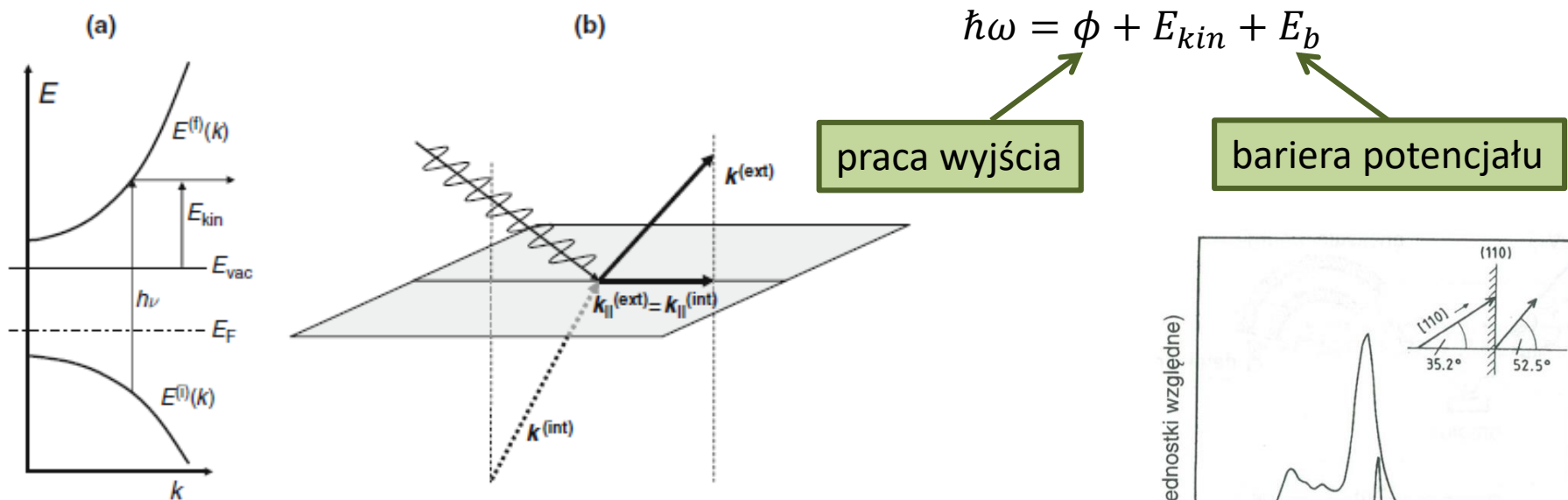
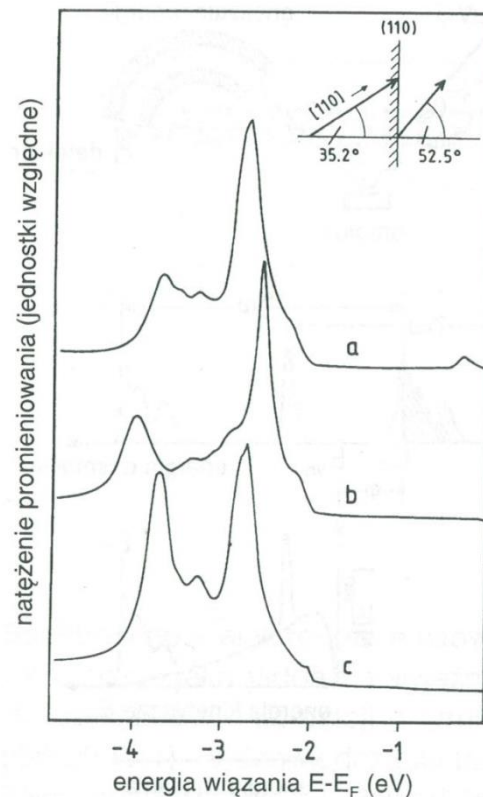


Fig. V.3. Illustration of the photoemission process. (a) A photon of energy $h\nu$ excites an electron from the initial state $E^{(i)}(k)$ to the final state $E^{(f)}(k)$ above the vacuum level E_{vac} . The kinetic energy of the photoemitted electron is $E_{kin} = E^{(f)}(k) - E_{vac}$. (b) The wave vectors of the electron inside $k^{(int)}$ and outside $k^{(ext)}$ have the same parallel components since the spatial phase $i\mathbf{r}_{||}k_{||}$ has to be identical to make the wave function continuous at any given point $\mathbf{r}_{||}$ of the surface

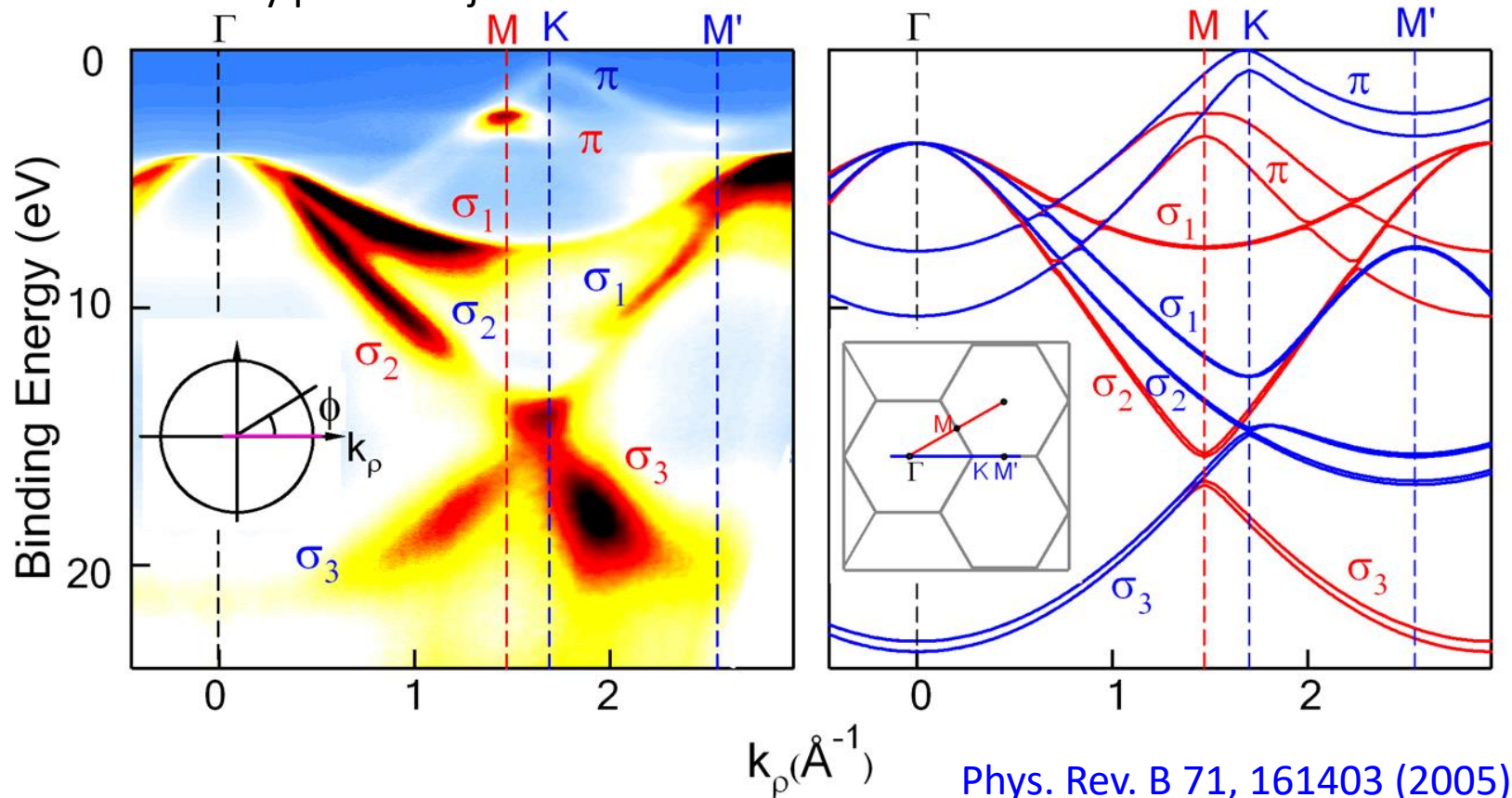
Rys. V.2. Pomiar rozkładu kątownego widma fotoelektronów z powierzchni miedzi. Widmo (a) zarejestrowano z powierzchni Cu(111) w kierunku [111]. Widma (b) i (c) pochodzą z powierzchni Cu(110) i rejestrowane były pod kątami biegunowymi odpowiednio $35,2^\circ$ i $52,5^\circ$. Wielkość wektora \mathbf{k} stanu początkowego odpowiadającego widmu (a) wyznaczona jest przez rzut wektora \mathbf{k} , dla którego takie samo widmo rejestrowane jest z powierzchni (110) (wg [V.2])



Spektroskopia fotoemisyjna

Struktura pasmowa ciał stałych

Wyznaczanie struktury pasmowej



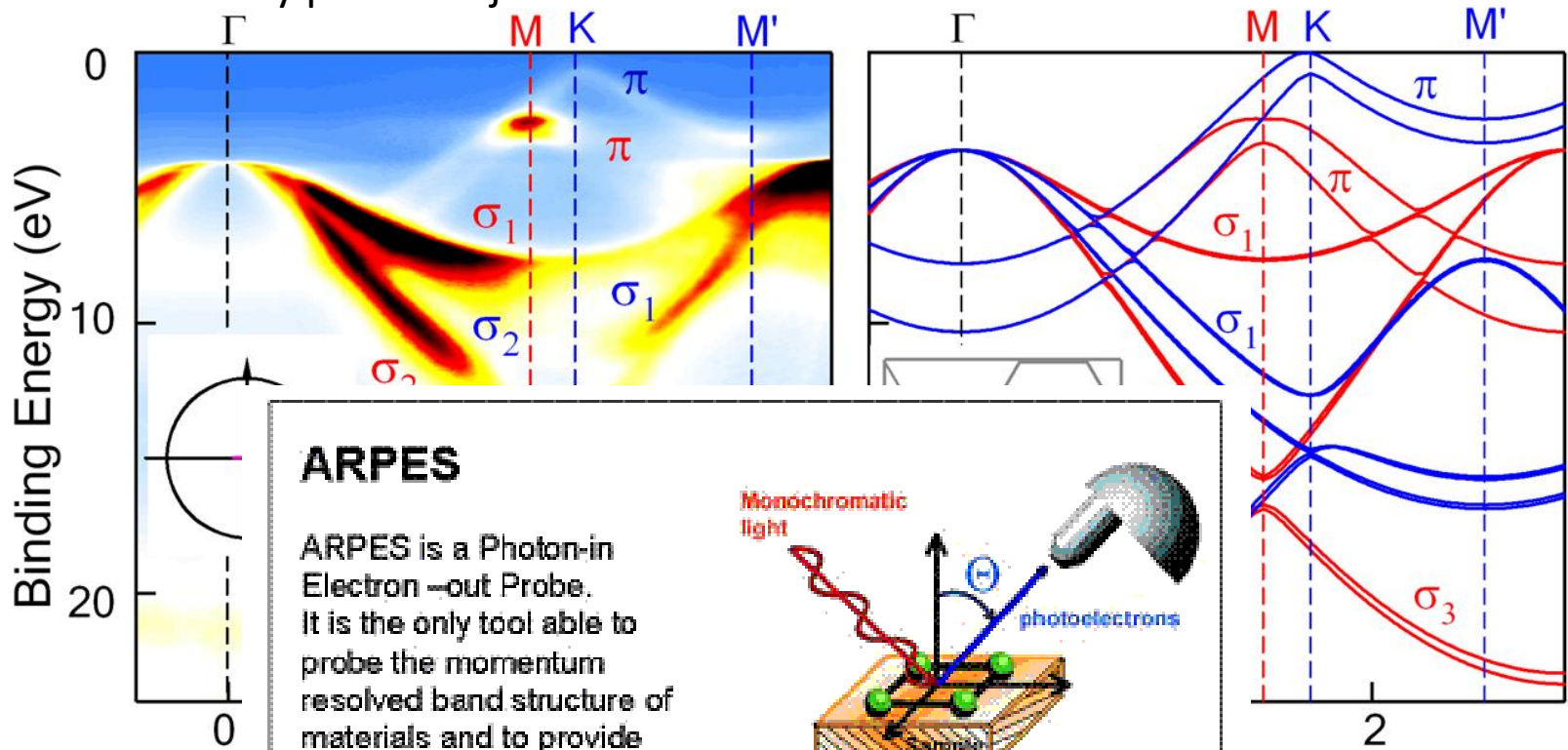
Phys. Rev. B 71, 161403 (2005)

<http://www.physics.berkeley.edu/research/lanzara/research/Graphite.html>

Spektroskopia fotoemisyjna

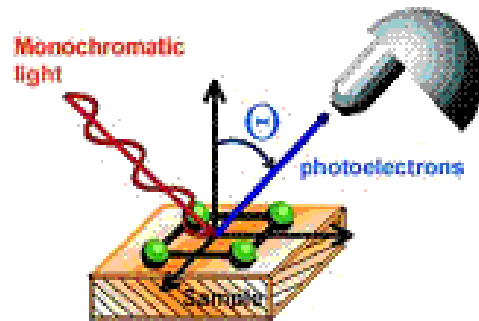
Struktura pasmowa ciał stałych

Wyznaczanie struktury pasmowej



ARPES

ARPES is a Photon-in Electron-out Probe. It is the only tool able to probe the momentum resolved band structure of materials and to provide direct insight on the many interaction in solids.

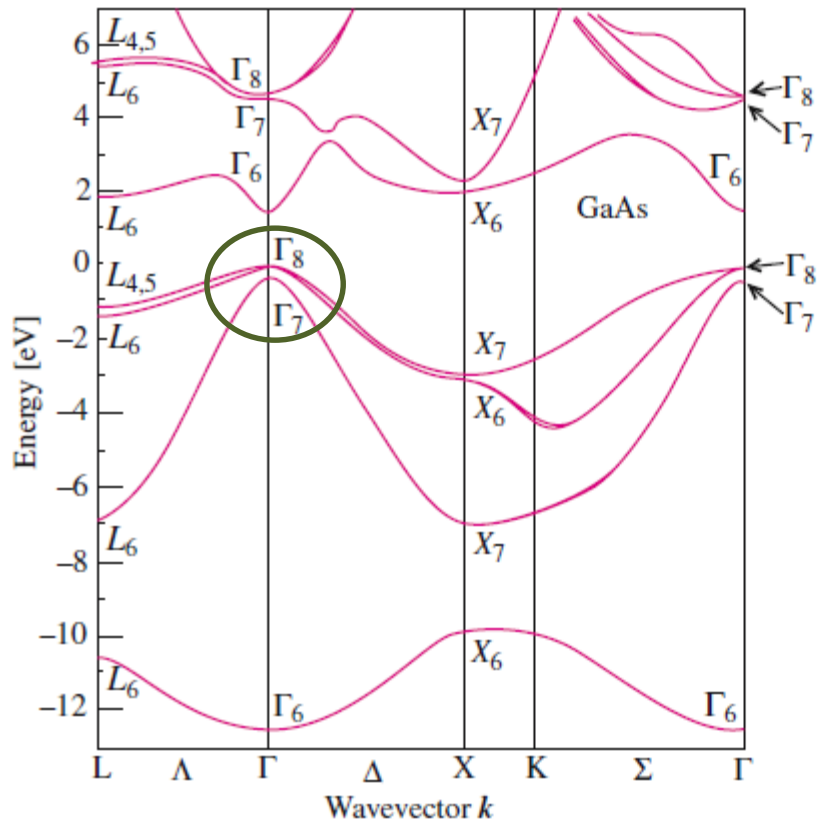


71, 161403 (2005)

ra/research/Graphite.html

Struktura pasmowa

Yu, Cardona *Fundamentals of semiconductors*



$$|lm_l\rangle = \begin{cases} |1\ 1\rangle & = -(x + iy)/\sqrt{2}, \\ |1\ 0\rangle & = z, \\ |1\ -1\rangle & = (x - iy)/\sqrt{2}. \end{cases}$$

$$|jm_j\rangle = \begin{cases} |3/2, 3/2\rangle = |1, 1\rangle\alpha \\ |3/2, 1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, 1\rangle\beta + \sqrt{2}|1, 0\rangle\alpha) \\ |3/2, -1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, -1\rangle\alpha + \sqrt{2}|1, 0\rangle\beta) \\ |3/2, -3/2\rangle = |1, -1\rangle\beta \\ |1/2, 1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, 0\rangle\alpha - \sqrt{2}|1, 1\rangle\beta) \\ |1/2, -1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, 0\rangle\beta - \sqrt{2}|1, -1\rangle\alpha) \end{cases}$$

Fig. 2.14. Electronic band structure of GaAs calculated by the pseudopotential technique. The energy scale and notation (double group) are similar to those for Fig. 2.13 [Ref. 2.8, p. 103]

Model ciasnego wiązania (LCAO)

Dla struktury sc: $\vec{R}_n - \vec{R}_m = (\pm a, 0, 0); (0, \pm a, 0); (0, 0, \pm a);$

$$E_n(\vec{k}) \approx E_j - A_j - 2B_j[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]$$

$$B_j = - \int \varphi_j^*(\vec{r} - \vec{R}_m) [V'(\vec{r} - \vec{R}_n)] \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}_n) dV$$

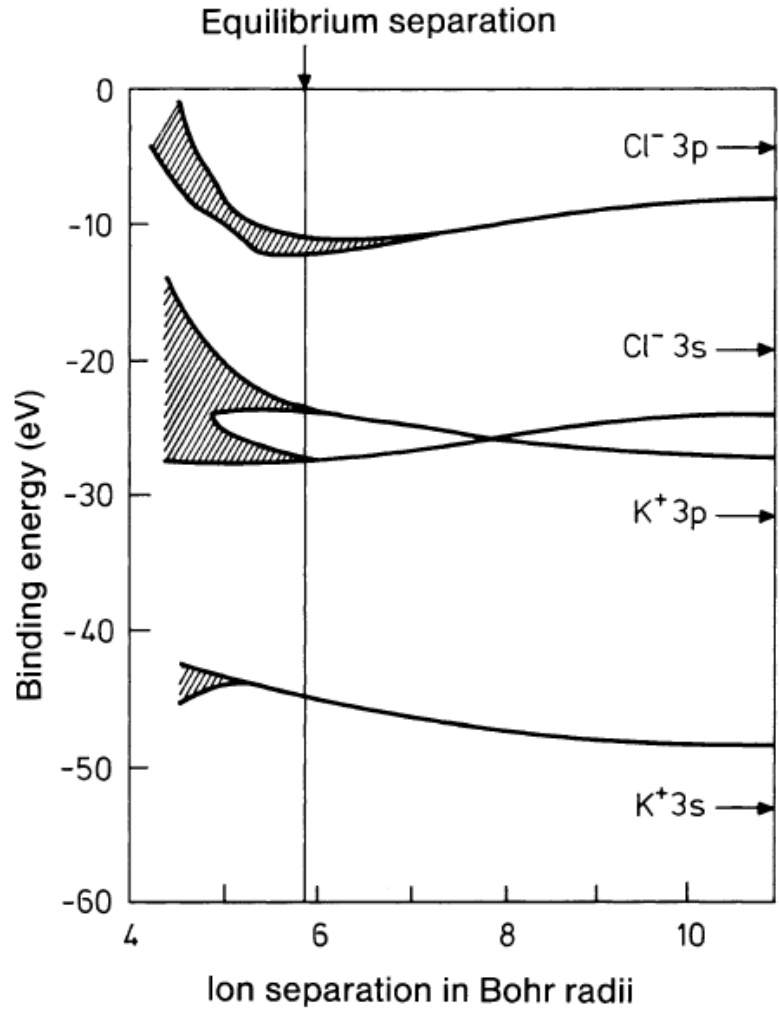
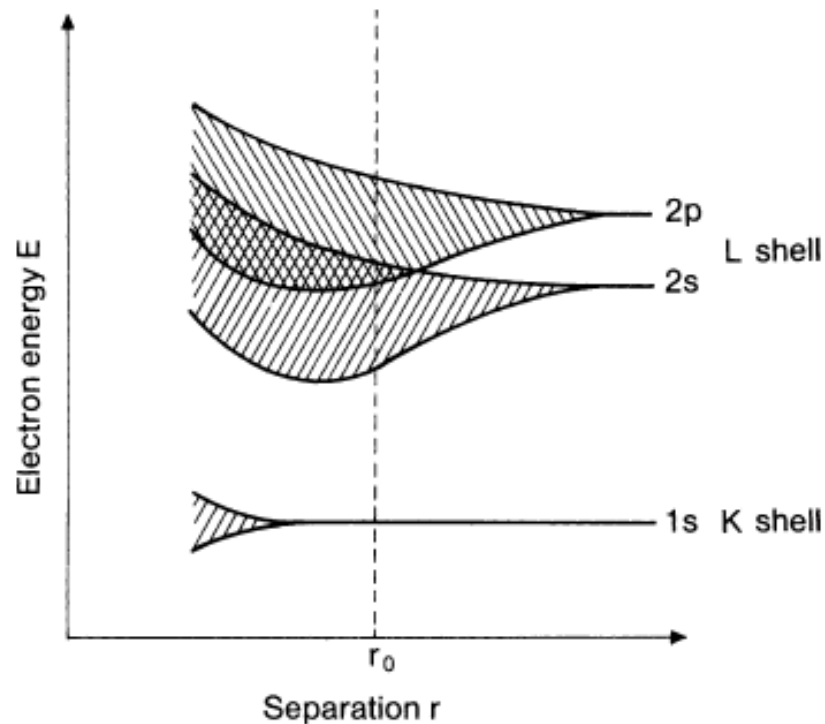


Fig. 7.10. The four highest occupied energy bands of KCl calculated as a function of the ionic separation in Bohr radii ($a_0 = 5.29 \times 10^{-9}$ cm). The energy levels in the free ions are indicated by arrows. (After [7.2])

Metoda ciasnego wiązania - wnioski

W ramach metody ciasnego wiązania powstawanie pasm wyjaśniamy jako efekt wzajemnego oddziaływania stanów atomowych poszczególnych atomów tworzących ciało stałe. Stany atomowe klasyfikujemy jako należące do odpowiednich powłok:



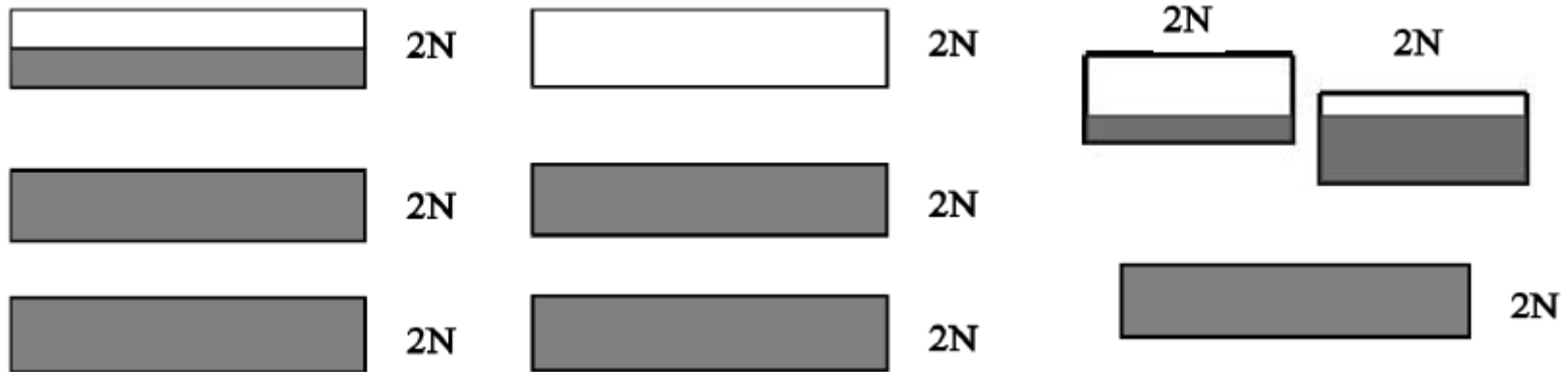
Jeśli w kryształcie makroskopowym mamy N komórek elementarnych, to każdemu stanowi atomowemu, odpowiada N lub $2N$ miejsc na elektrony – odpowiednio: bez uwzględnienia spinu lub z uwzględnieniem spinu

W takim razie, jeśli uwzględnić spin, to w **każdym paśmie** jest $2N$ miejsc na elektrony

Fig. 1.1. Broadening of the energy levels as a large number of identical atoms from the first row of the periodic table approach one another (schematic). The separation r_0 corresponds to the approximate equilibrium separation of chemically bound atoms. Due to the overlap of the $2s$ and $2p$ bands, elements such as Be with two outer electrons also become metallic. Deep-lying atomic levels are only slightly broadened and thus, to a large extent, they retain their atomic character

Metoda ciasnego wiązania - wnioski

W ramach metody ciasnego wiązania powstawanie pasm wyjaśniamy jako efekt wzajemnego oddziaływania stanów atomowych poszczególnych atomów tworzących ciało stałe. Stany atomowe klasyfikujemy jako należące do odpowiednich powłok:



Nieparzysta liczba elektronów na komórkę (metal)

Parzysta liczba elektronów na komórkę (niemetal)

Parzysta liczba elektronów na komórkę ale przekrywające się pasma (metale II grupy, np. Be → slajd wcześniej!)

Metoda ciasnego wiązania - wnioski

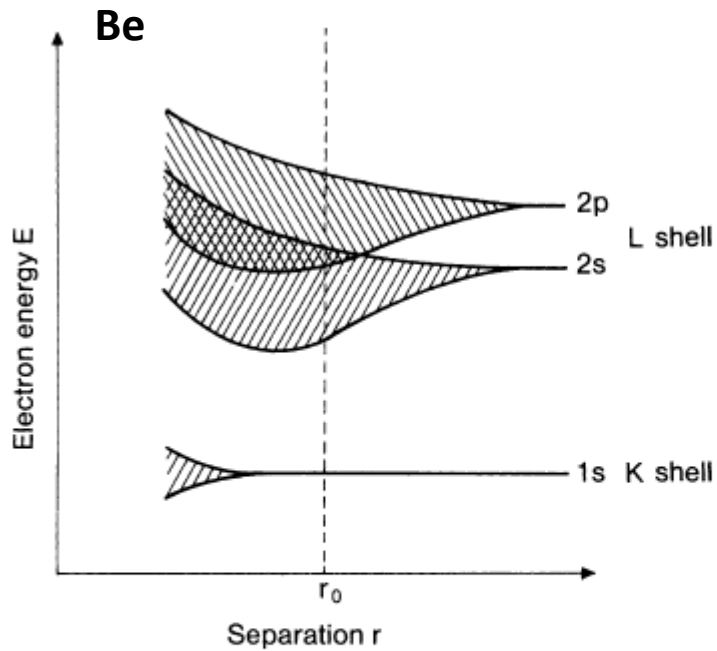


Fig. 1.1. Broadening of the energy levels as a large number of identical atoms from the first row of the periodic table approach one another (schematic). The separation r_0 corresponds to the approximate equilibrium separation of chemically bound atoms. Due to the overlap of the $2s$ and $2p$ bands, elements such as Be with two outer electrons also become metallic. Deep-lying atomic levels are only slightly broadened and thus, to a large extent, they retain their atomic character

C, Si, Ge

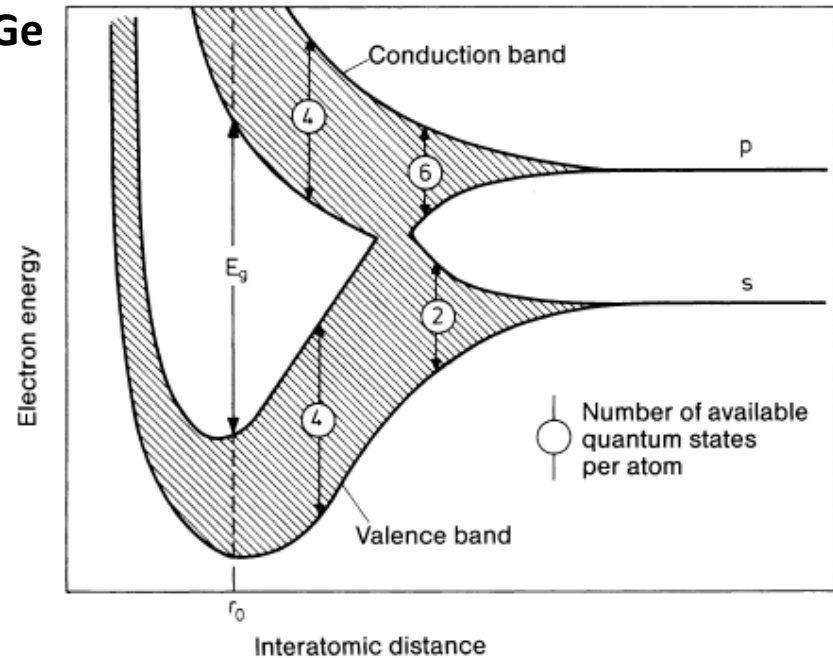


Fig. 7.9. Schematic behavior of the energy bands as a function of atomic separation for the tetrahedrally bound semiconductors diamond (C), Si, and Ge. At the equilibrium separation r_0 there is a forbidden energy gap of width E_g between the occupied and unoccupied bands that result from the sp^3 hybrid orbitals. For diamond, the sp^3 hybrid stems from the $2s$ and $2p^3$ atomic states, for Si from the $3s$ and $3p^3$, and for Ge from the $4s$ and $4p^3$. One sees from this figure that the existence of a forbidden energy region is not tied to the periodicity of the lattice. Thus amorphous materials can also display a band gap. (After [7.1])

Tight-Binding Approximation

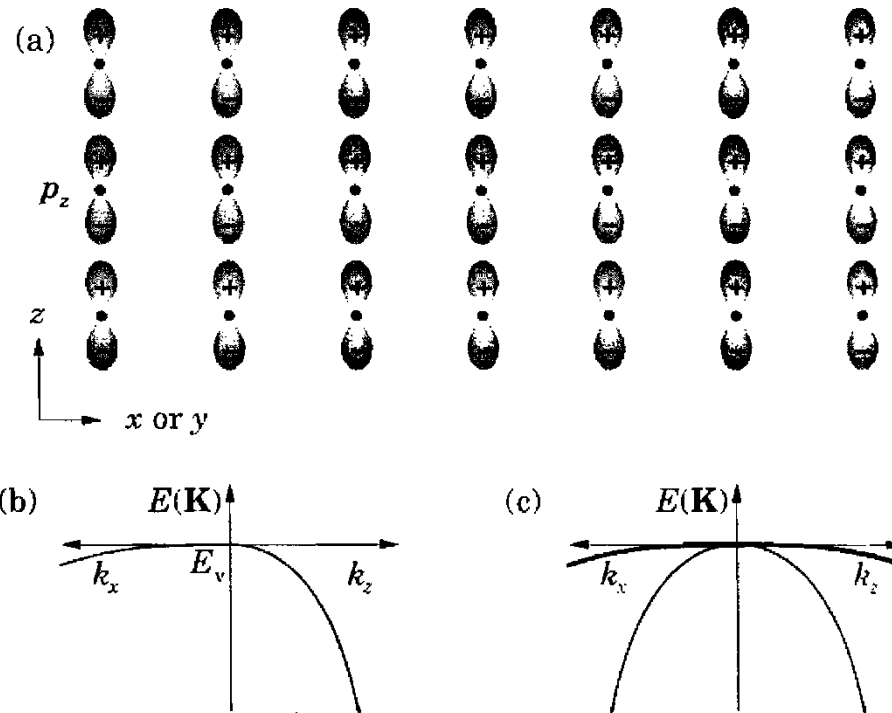


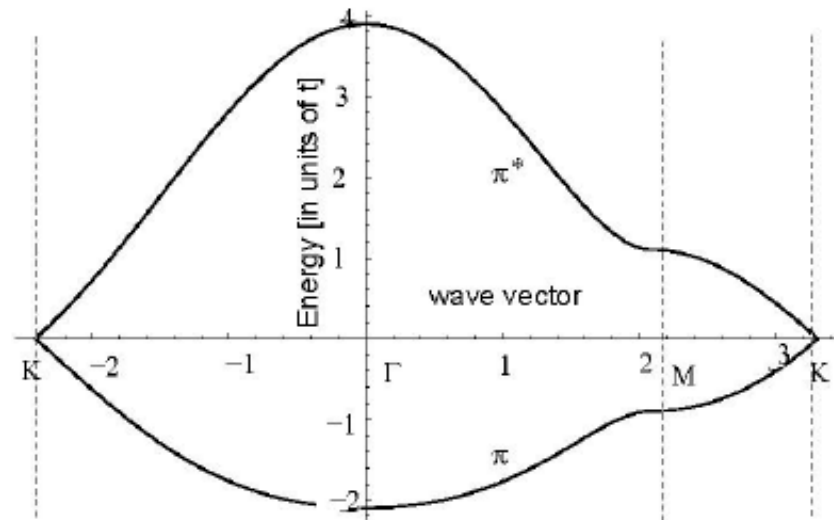
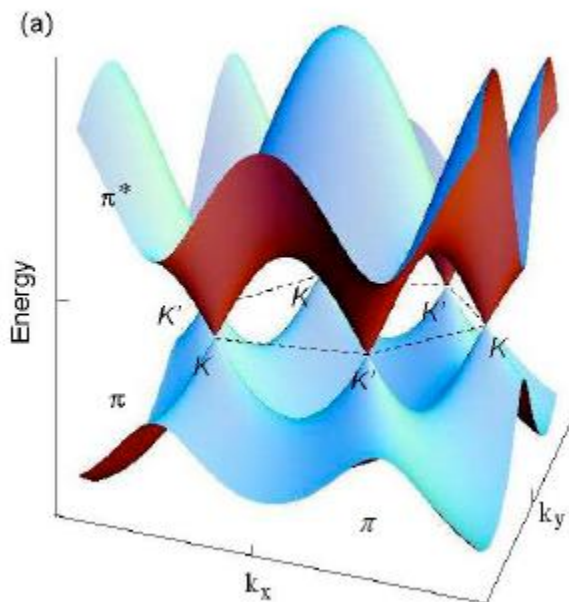
FIGURE 2.17. Valence bands constructed from p orbitals. (a) Lattice of p_z orbitals. (b) Band structure of the p_z orbitals only; the band is 'light' along k_z to the right and 'heavy' along k_x (or k_y) to the left. (c) Total bands from all three p orbitals, showing a doubly degenerate 'heavy' band and a single 'light' band.

Gęstość stanów 2D - grafen

Liniowa zależność dyspersyjna w grafenie:

Metoda ciasnego wiązania przy uwzględnieniu oddziaływania z najbliższymi sąsiadami [P. R. Wallace, „The Band Theory of Graphite”, Physical Review 71, 622 (1947).] daje :

$$E(\vec{k}) = \pm \sqrt{\gamma_0^2 \left(1 + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2} + 4 \cos \frac{k_y a}{2} \cdot \cos \frac{k_x \sqrt{3} a}{2} \right)} \approx \hbar c |\vec{k} - \vec{k}_i|$$

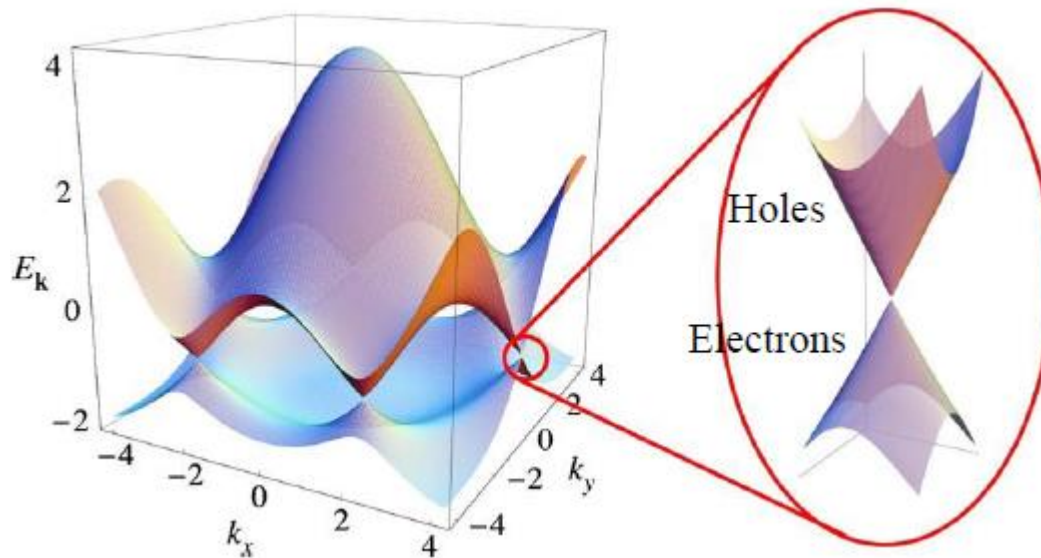


Gęstość stanów 2D - grafen

Liniowa zależność dyspersyjna w grafenie:

Metoda ciasnego wiązania przy uwzględnieniu oddziaływania z najbliższymi sąsiadami [P. R. Wallace, „The Band Theory of Graphite”, Physical Review 71, 622 (1947).] daje :

$$E(\vec{k}) = \pm \sqrt{\gamma_0^2 \left(1 + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2} + 4 \cos \frac{k_y a}{2} \cdot \cos \frac{k_x \sqrt{3} a}{2} \right)} \approx \hbar \tilde{c} |\vec{k} - \vec{k}_i|$$





"Mr. Osborne, may I be excused? My brain is full."