

Zadanie 5

Zastosowanie metody ciasnego wiązania do wyznaczenia struktury pasmowej grafenu.

W metodzie ciasnego wiązania (TB) przyjmuje się, że elektrony są silnie związane z macierzystymi atomami, a ich stany są tylko zaburzone przez obecność sieci = sąsiednich atomów.

Biorąc pod uwagę oddziaływanie elektronów na poszczególnych atomach (tzw. *hopping*) z najbliższymi sąsiadami (co najwyżej z trzecimi) można uzyskać poprawną strukturę pasmową. Metoda ta zostanie użyta do wyznaczenia struktury pasmowej grafenu.

Układ jest periodyczny, czyli jest prawdziwe tw. Blocha mówiące, że stan własny elektronu w układzie periodycznym (kryształ) można przedstawić jako iloczyn czynnika blochowskiego i funkcji mającej periodyczność kryształu.

Metoda ciasnego wiązania polega na rozwinięciu funkcji własnej elektronu w kryształ w szereg funkcji atomowych, zlokalizowanych na poszczególnym atomie (wektor \vec{R} określa położenie atomu); pojedyncza funkcja bazowa ma postać:

$$\phi_{p,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} u_p(\vec{r} - \vec{R})$$

Stan Blocha ma więc postać

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_p C_p(\vec{k}) \phi_{p,\vec{k}}(\vec{r})$$

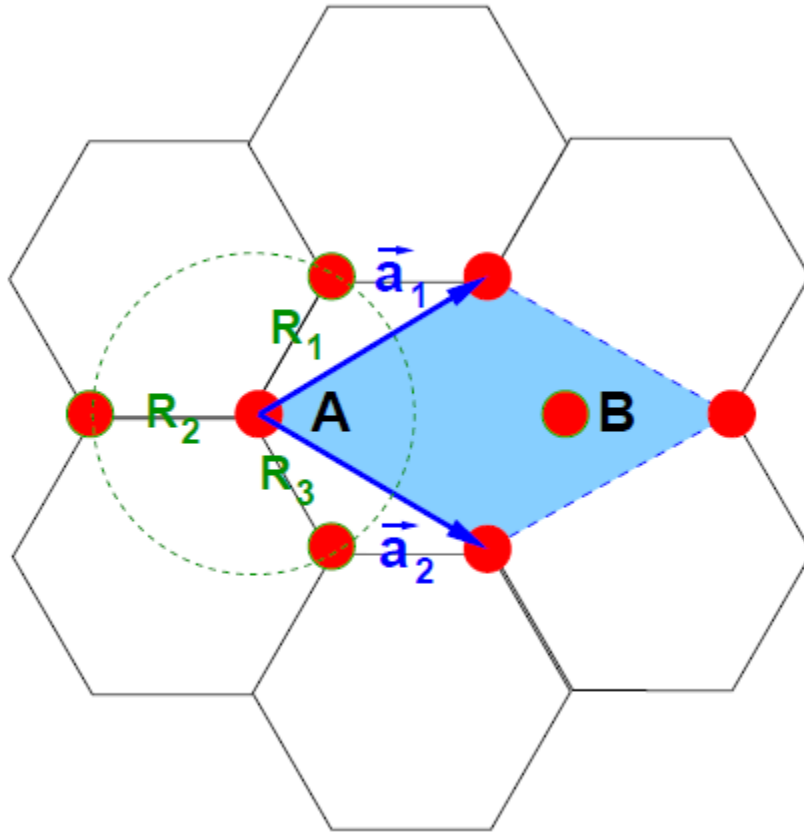
Współczynniki $C_p(\vec{k})$ mogą być otrzymane z rozwiązania uogólnionego problemu własnego:

$$\mathbf{H}\mathbf{C}(\mathbf{k}) = E\mathbf{S}\mathbf{C}(\mathbf{k})$$

$$H_{pq} = \langle \phi_{p,\mathbf{k}} | H | \phi_{q,\mathbf{k}} \rangle$$
$$S_{pq} = \langle \phi_{p,\mathbf{k}} | \phi_{q,\mathbf{k}} \rangle$$

Jest to więc typowy problem stacjonarny z hamiltonianem jednocząstkowym, należy tylko pamiętać o czynniku eksponencjalnym.

Geometria grafenu jest znana, komórkę prymitywną tworzą dwa atomy węgla (A i B), jak pokazuje poniższy rysunek:



Wektory \vec{a}_1 i \vec{a}_2 wyznaczają komórkę. W najprostszym przybliżeniu wystarczy ograniczyć się do bazy składającej się ze stanów $|p_z\rangle$ atomów węgla oraz do oddziaływania jedynie z najbliższymi sąsiadami. W takim przypadku należy rozwiązać zagadnienie własne postaci

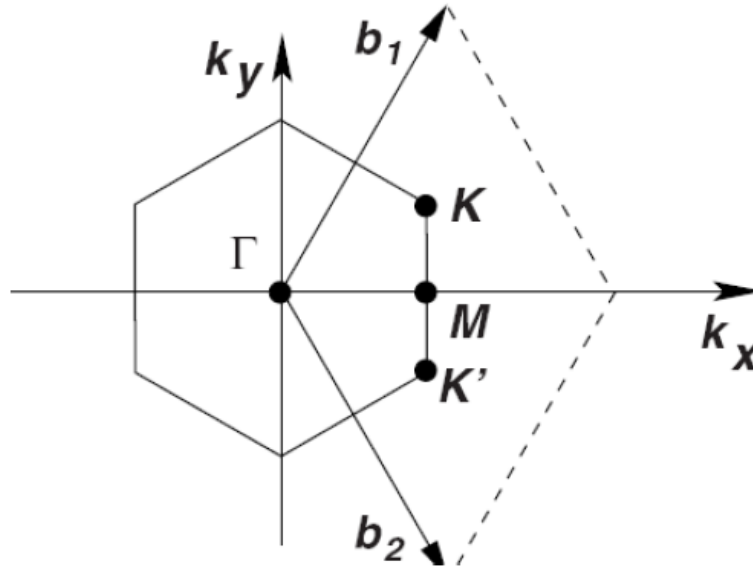
$$\begin{pmatrix} H_{AA}(\vec{k}) & H_{AB}(\vec{k}) \\ H_{BA}(\vec{k}) & H_{BB}(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}) \\ \Psi_B(\vec{k}) \end{pmatrix} = E(\vec{k}) \begin{pmatrix} S_{AA}(\vec{k}) & S_{AB}(\vec{k}) \\ S_{BA}(\vec{k}) & S_{BB}(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}) \\ \Psi_B(\vec{k}) \end{pmatrix}$$

Zagadnienie to jest wymiaru 2x2 (dwa atomy w komórce x jedna funkcja bazy), poszczególne elementy macierzy to pewne całki hamiltonianu z funkcjami bazowymi. W met. TB nie liczy się ich jednak, ale zastępuje pewnymi parametrami. Końcowa postać elementów macierzy to:

$$\begin{aligned} H_{AB} &= \gamma_0(e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_3}) \\ S_{AB} &= s_0(e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_3}) \\ H_{AA} &= \varepsilon_{2p} \\ S_{AA} &= 1 \\ H_{AB}^* &= \gamma_0(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_3}) \\ S_{AB}^* &= s_0(e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_3}) \end{aligned}$$

gdzie ε_{2p} , γ_0 i s_0 są pewnymi parametrami a R_1, R_2, R_3 są położeniami najbliższych sąsiadów, liczone względem jednego z atomów ($R_1 \rightarrow R_A - R_1$).

Układ jest dwuwymiarowy, zatem aby otrzymać strukturę należy obrać pewną ścieżkę w przestrzeni wektorów k . W przypadku grafenu I strefa Brillouina ma następującą postać:



Do obliczeń wybrać ścieżkę $M-\Gamma-K-M$.

Zadanie: Wyznaczyć strukturę pasmową grafenu dla nast. parametrów: $\gamma_0 = -2.78$, $s_0 = 0.06$, $\varepsilon_{2p} = 0.0$.

Pozostałe dane:

Wsp. punktów charakterystycznych strefy Brillouina: $M(0, 1/2)$, $K(1/3, 1/3)$, $\Gamma(0, 0)$

Wsp. najbliższych sąsiadów i atomu A:

$RA[0]$	$= 0.666667000;$	$RA[1]$	$= 1.333333000;$
$R1[0]$	$= 0.333333000;$	$R1[1]$	$= 1.666667000;$
$R2[0]$	$= 1.333333000;$	$R2[1]$	$= 1.666667000;$
$R3[0]$	$= 0.333333000;$	$R3[1]$	$= 0.666667000;$