

تئوری «Tight-Binding»:

در این مدل هابیتون ها هابیتون اتمی است.

overlap بین جابرات

$$H = H_{atom} + \Delta U$$

↑
تئوری تئوری

$$H \psi_n = H_{atom} \psi_n + \Delta U(r) \psi_n$$

عنصر صفت است

فوق تئوری دوری است «تئوری تئوری تئوری»

$$H_{crystal} \rightarrow \psi_{n,k}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{n,k}(\vec{r})$$

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

ترکیب خط از N اوربیتال اتمی به صورت تابع موج متوسط تابع موج را به دست می آوریم:

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} \psi_{n,k}(\vec{r} - \vec{R}')$$

$$\begin{cases} \Delta U(r) \approx 0 \\ \psi_n(r) \neq 0 \end{cases}$$

در این حالت

تابع موج را به جای اینکه به هر یک ترکیب خط از اوربیتال اتمی به صورت تابع موج را به دست می آوریم که دقیقاً اوربیتال اتمی نیستند بلکه به آن ها نزدیک هستند.

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi(\vec{r} - \vec{R})$$

(Wannier function)

ترکیب خط از اوربیتال اتمی که نزدیک ψ_n هستند را داریم:

$$\phi(\vec{r} - \vec{R}) = \sum_n b_n \psi_n(\vec{r} - \vec{R})$$

در این:

$$\int \psi_m^*(\vec{r}) H_{total} \psi_n(\vec{r}) d\vec{r} = \int \psi_m^*(\vec{r}) H_{atom} \psi_n(\vec{r}) d\vec{r} + \int \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) d\vec{r}$$

مزدوج

اوربیتال اتمی

این را از هم کم می کنیم

$$\Rightarrow E(k) \sum_{\vec{R}} \sum_n \int \psi_m^*(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_n \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r} = E_m \sum_{\vec{R}} \sum_n \int \psi_m^*(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_n \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$$

I

$$+ \int \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \sum_n b_n \psi_n(\vec{r}) d\vec{r} + \int \psi_m^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \sum_{\vec{R} \neq 0} \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_n \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) d\vec{r}$$

R=0 II III

(Linear Combination of atomic Orbitals)

استفاده از تقریب (LCAO)

$$I: \begin{cases} R=0: (E(K)-E_m) \sum_n b_n \delta_{m,n} \\ R \neq 0: (E(K)-E_m) \sum_n b_n \left(\sum_{R \neq 0} \int \psi_m^*(r) \psi_n(r-R) e^{iK \cdot R} d\vec{r} \right) \end{cases}$$

$$II: \sum_n b_n \int \psi_m^*(r) \Delta U(r) \psi_n(r) d\vec{r}$$

$$III: \sum_n b_n \int \sum_{R \neq 0} \psi_m^*(r) \Delta U(r) \psi_n(r-R) e^{iK \cdot R} d\vec{r}$$

هر کوچک
مستند
&
اگر به صورت
تادی بودند

$$* (E(K)-E_m) b_m \approx 0 \text{ others is small.}$$

b_m مربوط به انرژی E_m بزرگ است و بقیه b_m ها کوچک است

$$E_m \Rightarrow \begin{cases} \text{تک تک} \Rightarrow \phi(r) = b \psi_m \\ \text{تجمع} \Rightarrow \phi(r) = b_1 \psi_{1m} + b_2 \psi_{2m} + b_3 \psi_{3m} + \dots \end{cases}$$

ترجیح داریم که های نزدیک ترین هیبرید را دارند در نتیجه به حساب افتاده
های نزدیک را جمع و زنجیره بزرگ R .

$$\phi(r) = b_s \psi_s(r)$$

$$(E(K)-E_s): \text{small}$$

از S -band $\Leftarrow S$ -level

تجمع نزدیک در نتیجه b_n ها کوچک است

$$(E(K)-E_s) b_s = - (E(K)-E_s) b_s \left(\sum_{R \neq 0} \int \psi_s^*(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}-\vec{R}) e^{iK \cdot \vec{R}} d\vec{r} \right) + (b_s / \int \psi_s^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}) d\vec{r}) + b_s \left(\sum_{R \neq 0} \int \psi_s^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}-\vec{R}) e^{iK \cdot \vec{R}} d\vec{r} \right)$$

$$\alpha(\vec{R}) = \int d\vec{r} \phi^*(r) \phi(r-\vec{R})$$

$$\beta(\vec{R}) = - \int d\vec{r} \Delta U(r) |\phi(r)|^2$$

$$\gamma(\vec{R}) = - \int d\vec{r} \phi^*(r) \Delta U(r) \phi(r-R)$$

$$(E(K)-E_s) = \frac{-\beta - \sum_{R \neq 0} \gamma(R) e^{iK \cdot R}}{1 + \sum_{R \neq 0} \alpha(R) e^{iK \cdot R}} \Rightarrow (E(K)-E_s) = -\beta - \sum_{R \neq 0} \gamma(R) e^{iK \cdot R}$$

از 1 خطی کوچک تر است و صرف نظری شود

$$E(\vec{K}) = E_s - \beta - \sum_{R \neq 0} \gamma(R) e^{iK \cdot R} - \sum_{R \neq 0} \gamma(R) e^{iK \cdot R}$$

داریم $\gamma(R) = \gamma(-R)$ در نتیجه:

$$R \xrightarrow{\text{تغییر متغیر}} -R' \Rightarrow R'_1$$

$$\text{در } E(\vec{k}) = E_S - \beta - \sum_{R_j} \gamma(R_j) \underbrace{(e^{i\vec{k} \cdot R_j} + e^{-i\vec{k} \cdot R_j})}_{2\cos(\vec{k} \cdot R_j)}$$

$$E(\vec{k}) = E_S - \beta - \sum_{R=nn} 2\gamma(R) \cos(\vec{k} \cdot R)$$

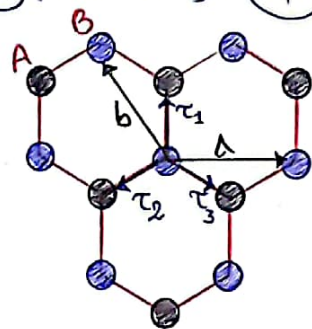
* β وابستگی به \vec{k} ندارد و یک تصحیح برای E_S است که آن را مثبت و منفی و در آن گشت $+R$

$$\gamma = \int dr \phi^*(r) \Delta u(r) \phi(\kappa - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2}, z)$$

در گذشتن از روش 2 بعدی T.B. استفاده می کنیم.

گرایش یک ماده 2 بعدی و یک گرایش است.

$$b \text{ بردارهای اولیه هستند} \quad a = (a, 0) \quad b = (-\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2})$$



$$\tau_1 = (0, \frac{a}{\sqrt{3}}) \quad \tau_2 = (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2\sqrt{3}}) \quad \tau_3 = (\frac{a}{2}, \frac{a}{2\sqrt{3}})$$

$$\Gamma = (0,0) \quad K_- = (\frac{2\pi}{a})(\frac{2}{3}, 0) \quad K_+ = (\frac{2\pi}{a})(\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}})$$

$$a = 1.42 \text{ \AA}$$

$$H = -t \sum_{R_B} \sum_{\ell=1}^3 a_{R_B}^+ + \tau_{\ell} b_{R_B} + H.c.$$

حاصل می شود چنانکه الکترون α :

H.c. مصنف همیغ هر یک است. این اتم در حلقه $a_{R_B}^+ a_{R_A}^+$ خلق و $a_{R_B} a_{R_A}$ الکترون را در R_B و R_A فنا می کنند.

t ثابت تبادل بین حلقه های مجاور است و مقدارش 3 eV و جهت

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{RA} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot R_A} \alpha_k \\ b_{RB} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot R_B} \beta_k \end{array} \right. \Rightarrow \text{نمای داری و به یک کگت است.}$$

در اینجا $k = (k_x, k_y) \Leftarrow$ بردارهای باجهت x و y را نشان می دهد.

$$H_K = -t \sum_{R_B} \sum_{\ell=1}^3 e^{-i\vec{k} \cdot \tau_{\ell}} a_k^+ \beta_k + H.c.$$

$$|\psi(k)\rangle = (A\alpha_k^\dagger + B\beta_k^\dagger)|0\rangle$$

حالت پایه

$$\alpha_k|0\rangle = \beta_k|0\rangle = 0$$

$$H_k|\psi(k)\rangle = E|\psi(k)\rangle$$

همانگونه که خلق اثر کرده و یک $\psi(k)$ را می دهیم.

$$\begin{pmatrix} \alpha_k^\dagger & \beta_k^\dagger \\ \alpha_k & \beta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$f_{AB}(k) = -t \sum_{l=1}^3 e^{-ik\tau_l}$$

* در نتیجه $E_s = \sum |\psi(k)|^2$ دادی شود: α تبدیل جمع به ضرب \cos ها را می توان استفاده کرد

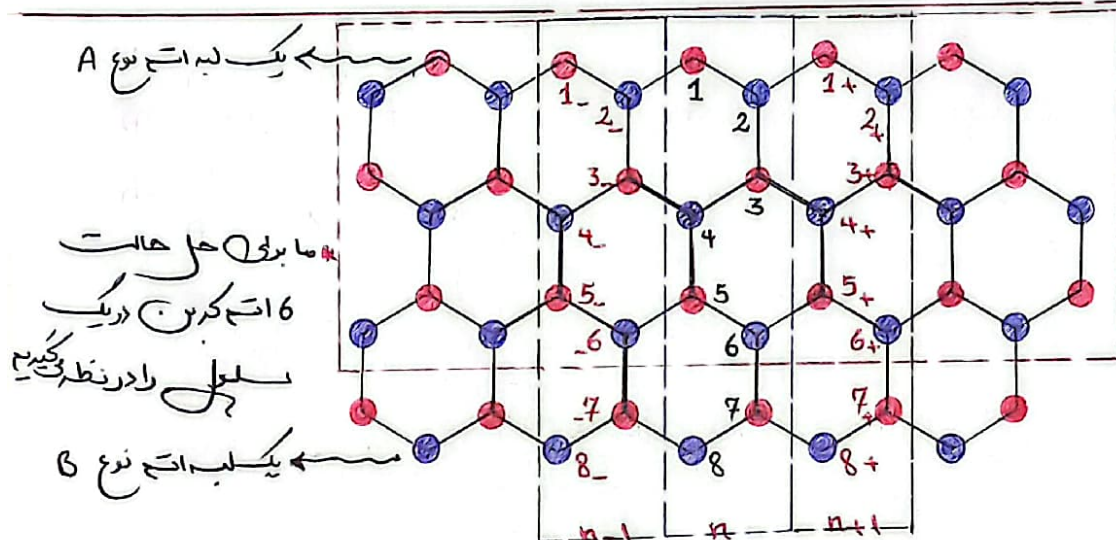
$$E_s(k) = st \left(3 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2} + \frac{k_y a}{2}\right) + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2} - \frac{k_y a}{2}\right) + 2 \cos(k_y a) \right)^{1/2}$$

$$= st \left(\frac{1}{4} + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) - 2 \right)^{1/2}$$

که $s \neq 1$ است. در راستای k یک الکترون است در نتیجه $E(k)$ بر $E_+(k)$ خالی است.

α به انرژی \times موج های مختلف k می توان نوارهای ناهمگرایی متفاوتی داشت.

در $k = \Gamma$ است اما به تدریج تغییر می دهد با انحراف k از Γ شروع به نفوذ تدریجی به مکان های داخلی می کند



انتخاب ناهمگرایی خاص
به سبب رنگی:

• ساختار مورد نظر:

* نوار دوره ای است
در راستای محور k .

$$\begin{cases} E\phi_n = H_{nn}\phi_n + H_{n,n-1}\phi_{n-1} + H_{n,n+1}\phi_{n+1} \\ E\phi_0 = H_{nn}\phi_0 + H_{n,n-1}\phi_{n-1}e^{-ika} + H_{n,n+1}\phi_{n+1}e^{ika} \end{cases} \quad \& \quad \phi_n = \phi \cdot e^{ikna}$$

$$H_{nn} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & E_0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -t & E_0 & -t & 0 & 0 \\ 3 & 0 & -t & E_0 & -t & 0 \\ 4 & 0 & 0 & -t & E_0 & -t \\ 5 & 0 & 0 & 0 & -t & E_0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & E_0 \end{pmatrix}$$

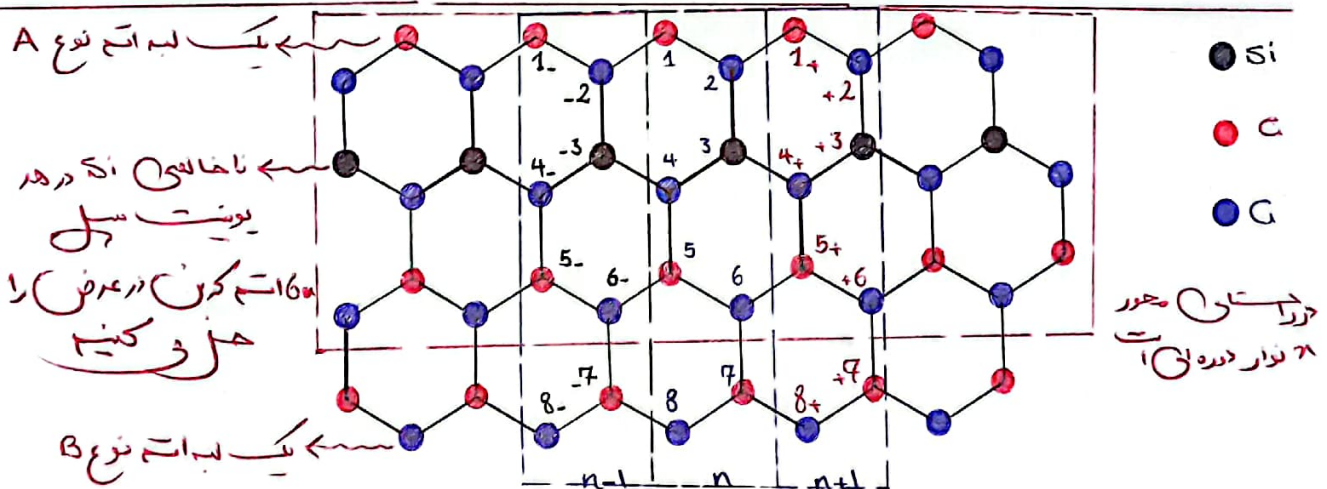
$$H_{n,n-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & -te^{-ika} & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & -te^{-ka} & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & -te^{-ka} \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_{n,n+1} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1+ & 2+ & 3+ & 4+ & 5+ & 6+ \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -te^{ika} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -te^{ika} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -te^{ika} & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$H_{tot} = H_{n,n} + H_{n,n+1} + H_{n,n-1}$$

$$H_{tot} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} E_0 & -t(1+e^{-ika}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t(1+e^{ika}) & E_0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & E_0 & -t(1+e^{ika}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t(1+e^{-ika}) & E_0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & E_0 & -t(1+e^{-ika}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -t(1+e^{ika}) & E_0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

این هاسیلتونی را به کمک پایتون و دیتا ویندوز مقادیر انرژی را محاسبه کند.



$$\begin{cases} E\phi_n = H_{nn}\phi_n + H_{n,n-1}\phi_{n-1} + H_{n,n+1}\phi_{n+1} & \& \phi_n = \phi_0 e^{ikna} \\ E\phi_0 = H_{nn}\phi_0 + H_{n,n-1}\phi_0 e^{-ika} + H_{n,n+1}\phi_0 e^{ika} \end{cases}$$

$$H_{n,n} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} E. & -t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & E. & -t' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t' & E. & -t' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t' & E. & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & E. & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -t & E. \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$H_{n,n-1} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1- & 2- & 3- & 4- & 5- & 6- \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & -te^{-ika} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t'e^{-ika} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -te^{-ika} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$H_{n,n+1} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1+ & 2+ & 3+ & 4+ & 5+ & 6+ \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -te^{ika} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t'e^{ika} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & te^{ika} & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$H_{tot} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} E. & -t(1+e^{-ika}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t(1+e^{ika}) & E. & -t' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t' & E. & -t'(1+e^{ika}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t'(1+e^{-ika}) & E. & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & E. & -t(1+e^{ika}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -t(1+e^{-ika}) & E. \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$H_{tot} = H_{n,n} + H_{n,n+1} + H_{n,n-1}$$