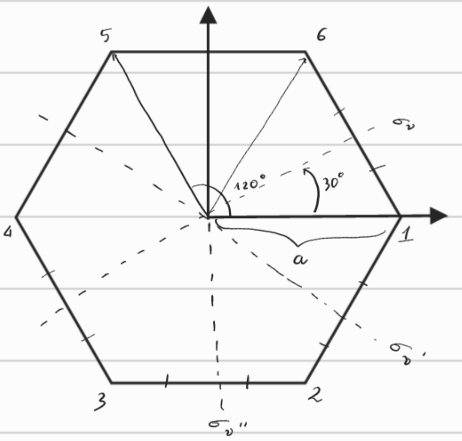

Định nghĩa ký hiệu và toán tử :

MX_2 đơn lớp là nhóm D_{3h} có các nhóm toán tử $\{E; 2C_3; 3\sigma_v\}$

trong đó : • E: phép xoay đơn vị : $E\vec{R_1} = \vec{R_1}$

• $2C_3 = \{C_3; \overset{\mapsto C_3 \cdot C_3}{C_3^2}\}$; tổng quát : C_n ; $C_n^{\,n} = E$

Toán tử xoay 1 góc $\frac{2\pi}{3}$; t^2 xoay 1 góc $\frac{2\pi}{n}$

vd: $C_3\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_5 \\ y_5 \end{pmatrix}$

• $3\sigma_v = \{\sigma_v; \sigma_v'; \sigma_v''\}$

Đối xứng qua mặt phẳng σ_v : $\sigma_v \vec{R_1} = \vec{R_6}$

σ_v' và σ_v'' lần lượt là σ_v xoay $\frac{2\pi}{3}$ và $\frac{4\pi}{3}$

Note : để gọn ; xem xét đặt : $\alpha = k_x \frac{a}{2}$; $\beta = k_y \frac{\sqrt{3}}{2} a$

• $\vec{k} \cdot (x; y) = k_x \cdot \vec{x} + k_y \vec{y}$

• $\cos(\varphi) = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}$; $\sin(\varphi) = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$

Các Bước Làm

1. Chỉ dùng các toán tử $\{E; C_3; C_3^2; \sigma_v; \sigma_v'; \sigma_v''\}$, biểu diễn tất cả $\vec{R_j}$ ($j \in \{1; \dots; 6\}$) theo $\vec{R_1}$; vd: $\vec{R_1} = E\vec{R_1}$; $\vec{R_3} = C_3(C_3 \vec{R_1}) = C_3^2 \vec{R_1}$

   Note: Thử biểu diễn các $\vec{R_j}$ bằng nhiều cách. Vd: $\vec{R_3} = C_3(C_3 \vec{R_1}) = \sigma_v'(\sigma_v \vec{R_1})$

2. cho phép xoay 1 góc θ là ma trận $R = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$; tìm ma trận C_3 và C_3^2

3. cho biết : $\sigma_v'' = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$: $\begin{cases} x \to -x \\ y \to y \end{cases}$

   tìm σ_v ; σ_v' bằng sự tương đương ở câu 1 : vd $C_3^2 = \sigma_v' \sigma_v$

4. Nhắc lại : $|d_{z^2}\rangle \sim \frac{z^2}{|\vec{r}|}$; $|d_{xy}\rangle \sim xy$; $|d_{x^2-y^2}\rangle \sim \underset{\uparrow \text{chú ý}}{\frac{x^2-y^2}{2}}$

   với $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \hat{R}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ hoặc $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_v \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$; tính $\frac{z'^2}{|\vec{r}'|}$; $x'y'$; $\frac{x'^2 - y'^2}{2}$

quy ước : $|d_{z^2}\rangle = |1\rangle$;
$|d_{xy}\rangle = |2\rangle$;
$|d_{x^2-y^2}\rangle = |3\rangle$

Nhận xét sự thay đổi của $\frac{z'^2}{|\vec{r}'|}$, khai triển $x'y'$; $\frac{x'^2 - y'^2}{2}$ theo xy ; $\frac{x^2 - y^2}{2}$

Từ đó, tìm biểu diễn của $|d_{z'^2}\rangle$; $|d_{x'y'}\rangle$; $|d_{x'^2-y'^2}\rangle$

theo $|d_{z^2}\rangle$; $|d_{xy}\rangle$; $|d_{x^2-y^2}\rangle$

vd : $\vec{R_4} = \sigma_v'' \vec{R_1}$: $\begin{cases} x' = -x \\ y' = y \end{cases} \to |d_{x'y'}\rangle \sim x'y' = -xy \to |d_{x'y'}\rangle = -|d_{xy}\rangle$

$|d_{x'^2-y'^2}\rangle \sim \frac{x'^2 - y'^2}{2} = \frac{(-x')^2 - y'^2}{2} = |d_{x^2-y^2}\rangle$

Nhắc lại :

$\langle m(r)|\hat{H}|n(r)\rangle$

$= \langle m(r)|E_n|n(r)\rangle$

$= E_n \delta_{mn}$

on-site Energy

5. Dùng kết quả để tính : $H_{mn}(\vec{k}) = \sum_{j=0}^{6} e^{i\vec{k}\vec{R_j}} \langle m(\vec{r})|\hat{H}|\underline{n(\vec{r} - \vec{R_j})}\rangle$

hint : $\begin{cases} |2(\vec{R_j})\rangle = a_j |2(\vec{R_1})\rangle + b_j |3(\vec{R_1})\rangle \\ |3(\vec{R_j})\rangle = a_j' |2(\vec{R_1})\rangle + b_j' |3(\vec{R_1})\rangle \end{cases}$

thích thì đọc :

Character table