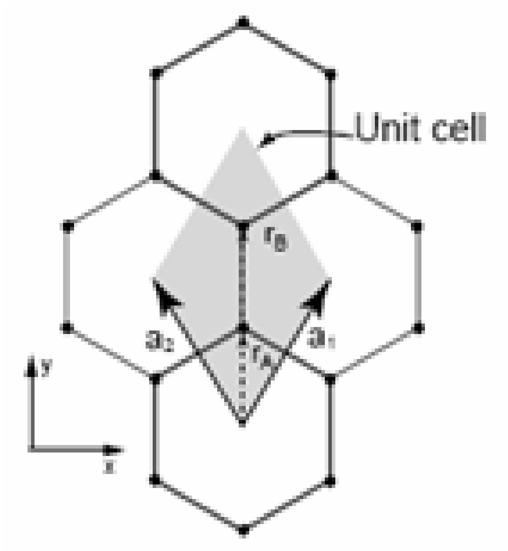
Približek tesne vezi: Grafen

JERNEJ KAVČIČ

28010385

Grafen ima 2D heksagonalno mrežo. Za vektorja Bravaisove mreže vzamemo



$$\vec{a}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right)$$
$$\vec{a}_2 = \left(-\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right)$$
$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$$

Sedaj lahko izračunamo elektronsko strukturo s pomočjo približka tesne vezi. K strukturi prispeva le ena orbitala na posamezen atom, v posamezni osnovni celici pa imamo 2 atoma. Najprej zapišemo Blochovo funkcijo

$$\Phi_\alpha(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \exp(i\vec{k}\vec{R})\phi_\alpha(\vec{r} - \vec{R})$$

kjer je ϕ_α valovna funkcija P_z orbitale.
Indeks α teče od 1 do n in predstavlja število orbital v osnovni celici. V našem primeru od 1 do 2, ker imamo 2 atoma.
Lastne funkcije elektronov sedaj lahko zapišemo kot linearno kombinacijo Blochovih funkcij za atoma $\vec{r}_A$ in $\vec{r}_B$.

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\alpha=1}^{2} c_{j,\alpha}(\vec{k})\Phi_\alpha(\vec{k}, \vec{r})$$

Valovno funkcijo Ψ_j vstavimo v Schrödingerjevo enačbo. Koeficient $c_{j,\alpha}$ mora biti izbran tako, da ima Ψ_j najmanjšo energijo.
Tako pridemo do enačbe

$$\det[\kappa - \varepsilon_i\zeta] = 0$$

Z ε_i označimo lastne vrednosti energije v približku tesne vezi.
κ,ζ sta 2×2 matriki

$$\kappa_{j,j^,}(\vec{k}) \;=\; \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle$$

$$\zeta_{j,j^,}(\vec{k}) \;=\; \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle$$

Z indeksoma A in B smo označili atoma v osnovni celici

$$\kappa_{AA} \;=\; \kappa_{BB} \;=\; \langle \Phi_A | H | \Phi_B \rangle$$

$$=\; \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \exp(i\vec{k}(\vec{R} - \vec{R}^{'})) \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | H | \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) \rangle$$

$$=\; \sum_{\vec{R}=\vec{R}'} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | H | \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) \rangle + \sum_{\vec{R}\neq\vec{R}'} \exp(i\vec{k}(\vec{R} - \vec{R}^{'})) \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{,}) | H | \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) \rangle$$

$$=\; \sum_{\vec{R}=\vec{R}'} \varepsilon_0 + \text{členi višjega reda} \;\approx\; \varepsilon_0$$

$$\kappa_{AB} = \kappa^*_{BA} = \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \exp(i\vec{k}^{'}(\vec{R} - \vec{R}^{'})) \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}^{'}) \rangle$$

$$=\; \sum_{\vec{R}=\vec{R}'} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}^{'}) \rangle + \sum_{\vec{R}'=\vec{R}+\vec{a}_1} \exp(-i\vec{k}\vec{a}_1) \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}) \rangle$$

$$+ \sum_{\vec{R}'=\vec{R}+\vec{a}_2} \exp(-i\vec{k}\vec{a}_2) \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}) \rangle \;+\; \text{členi višjega reda}$$

$$=\; t(1 + \exp(-i\vec{k}\vec{a}_1) + \exp(-i\vec{k}\vec{a}_2)) \;=\; tg(\vec{k})$$

Iz simetrije je vidno

$$\langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}) \rangle$$

$$=\; \langle \phi_A(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{a}_1)) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}) \rangle$$

$$=\; \langle \phi_A(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{a}_2)) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}) \rangle \;=\; t$$

$$\zeta_{AA} \;=\; \zeta_{BB} \;=\; 1$$

$$\zeta_{AB} \;=\; \zeta_{BA} \;=\; \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \exp(i\vec{k}(\vec{R} - \vec{R}^{'})) \langle \Phi_A(\vec{r} - \vec{R}^{'}) | \Phi_B(\vec{r} - \vec{R}^{'}) \rangle$$

$$= \sum_{\vec{R}=\vec{R}'} \langle \Phi_A(\vec{r} - \vec{R}')|\Phi_B(\vec{r} - \vec{R}')\rangle \; + \sum_{\vec{R}' - (\vec{R}+\vec{a}_1)} \exp(-i\vec{k}\vec{a}_1)\langle \phi_A|\phi_B\rangle$$

$$+ \sum_{\vec{R}' - (\vec{R}+\vec{a}_2)} \exp(-i\vec{k}\vec{a}_2)\langle \phi_A|\phi_B\rangle \; + \text{členi višjega reda} \; = \; \tilde{t}g(\vec{k})$$

$$\tilde{t} \; = \; \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R})|\phi_B(\vec{r} - \vec{R})\rangle$$

$$= \langle \phi_A(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{a}_1))|\phi_B(\vec{r} - \vec{R})\rangle \; = \; \langle \phi_A(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{a}_2))|\phi_B(\vec{r} - \vec{R})\rangle$$

$$\kappa \; = \; \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & tg(\vec{k}) \\ tg(\vec{k}) & \varepsilon_0 \end{pmatrix} \quad \zeta \; = \; \begin{pmatrix} 1 & \tilde{t}g(\vec{k}) \\ \tilde{t}g(\vec{k}) & 1 \end{pmatrix}$$

$$\det[\kappa \; - \; \varepsilon_i\zeta] \; = \; \begin{vmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon_i & (\tilde{t} - \varepsilon_i t)g(\vec{k}) \\ (\tilde{t} - \varepsilon_i t)g(\vec{k}) & \varepsilon_0 - \varepsilon_i \end{vmatrix} \; = \; 0$$

$$\varepsilon_i(\vec{k}) \; = \; \frac{\varepsilon_0 \pm |g(\vec{k})|t}{1 \pm |g(\vec{k})|\tilde{t}}$$

Člen $|g(\vec{k})|\tilde{t}$ zanemarim in ε_0 postavim na 0.

$$\varepsilon_i(\vec{k}) \; = \; \pm|g(\vec{k})|t$$

$$|g(\vec{k})| \; = \; \sqrt{1 \; + \; 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}a\right)\cos\left(\frac{k_x}{2}a\right) \; + \; 4\cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right)}$$

$$\varepsilon_i \; = \; 0 \Longrightarrow |g(\vec{k})| \; = \; 0$$

$$\vec{k}_{1,2} \; = \; \left(\pm\frac{4\pi}{3a}, 0\right) \quad \vec{k}_{3,4,5,6} \; = \; \left(\pm\frac{2\pi}{3a}, \pm\frac{2\sqrt{3}}{3a}\pi\right)$$

Disperzija energije v bližini točke, kjer je $\varepsilon_i = 0$

$$\vec{k} \; = \; \vec{k}_0 \; + \; \delta\vec{k} \quad \delta\vec{k} = \; (\delta\vec{k}_x, \delta\vec{k}_y) \quad \delta\vec{k}\,\text{majhen}$$

$$\varepsilon(\vec{k}) \; = \; \pm t|1 \; + \; \exp\left(- i(\vec{k}_0 \; + \; \delta\vec{k})\vec{a}_1\right) \; + \; \exp\left(- i(\vec{k}_0 \; + \; \delta\vec{k})\vec{a}_2\right)|$$

$$= \; \pm t\left|1 \; + \; \exp\left(i\delta\vec{k}\frac{\sqrt{3}}{2}a\right) \cdot 2\cos\left(\frac{2\pi}{3}a + \delta\vec{k}\frac{a}{2}\right)\right|$$

$$\approx \pm t\left|1 - 1 - i\frac{\sqrt{3}}{2}a\delta\vec{k}\right| \approx \pm\frac{\sqrt{3}}{2}at\left|\delta\vec{k}\right| \approx \frac{\sqrt{3}}{2}at\left|\vec{k} - \vec{k}_0\right|$$