

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

საკუთარი მნიშვნელობების ამოცანა ოთხკუთხა და ფიჭურ მესერზე

საბაკალავრო ნაშრომი

რევაზ ნიკოლაშვილი

ზუსტი და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი,

ფიზიკის დეპარტამენტი

ხელმძღვანელი:

პროფესორი მერაბ ელიაშვილი,
ასოცირებული-პროფესორი გიორგი ციციშვილი

თბილისი 2019

სარჩევი	
1 ანოტაცია	2
2 Anotation	3
3 შესავალი	4
4 ერთგანზომილებიანი მესერი	5
4.1 ფურიეს მწკრივები	5
5 ორგანზომილებიანი მესერი	9
5.1 ბრილუინის ზონა	9
5.2 მარტკუთხა მესერი	10
5.3 დახრილი მესერი	12
6 ექვსკუთხა მესერი	14
7 სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება	18
8 გამოყენებული ლიტერატურა	22

1 ანოტაცია

მიდგობას რომელსაც იყენებენ ასეთი ამოცანების დასმის დროს ჰქვია მჭიდრო ბმის მოდელი. რადგანაც ამოცანა დაბალგანზომილებიანია ითვლება ელექტრონების ენერგეტიკულ სტრუქტურა, მოახლოებული ტალღური ფუნქციის კრებულთ, რომელიც მიიღება იზოლირებული ატომების ტალღური ფუნქციების სუპერპოზიციით. მჭიდრო ბმის მოდელი კარგ შედეგებს გვაძლევს ბევრ შემთხვევაში. იოლადად ხდება მისი სხვა მოდელებთან გაერთინება უკეთესი შედეგების მისაღებად. მიუხედავად იმისა რომ ეს არის ერთ-ელექტრონული მოდელი, იგი საფუძველია რთული გამოთვლებისა, მაგალითად სხეულის ზედაპირული მდგომარეობების გამოსათვლელად. მაგალითად გრაფენის თხელი ფენის ან სხვა მასალის.

2 Anotation

The purpose of using such tasks is called the tight-binding model. Because the task is low-dimensional, the energy structure of the electrons is assumed with the upcoming wave function compound obtained by the suppression of the wavelength functions of isolated atoms. The tight-binding model gives good results in many cases. And it can be easily combined with other models to get better results. Regardless the fact that this is a single electronic model it is the basis for calculating difficulty, for example to calculate the surface conditions of the body. For example, a thin layer of graphene or other material.

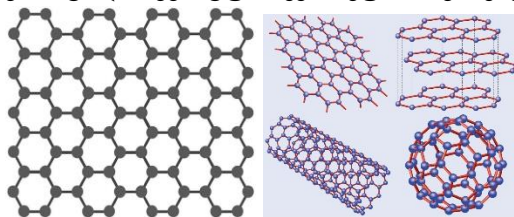
3 შესავალი

მჭიდრო-ბმის მოდელის აღება აუცილებელია შემდეგი გამოთვლებისთვის. მჭიდრო-ბმის მოდელის თანახმად, ელექტრონები არიან განთავსებულნი საკუთარი ატომის სტანდარტულ ორბიტალებზე და შემდეგ "ხტებიან" ატომიდან ატომში. მათემატიკურად ეს წარმოდგენილია როგორც "გადაფარვის (გადამხტომი) ინტეგრალი" (-t ალბათობა), რომელიც შეიძლება განვიხილოთ ისე როგორც ატომების ორბიტალების გადაფარვით წარმოქმნილი ელექტრონების კავშირი კრისტალში. ზოგადად ელექტრონების ელექტრონებთან ურთიერთქმედებას არ განიხილავენ, არამედ განიხილავენ თითოეული ელექტრონის ურთიერთქმედებას ატომებისა და ელექტრონების მიერ წარმოქმნილ გასაშუალოებულ ველში.

დაბალგანზომილებიან ელექტრონულ სისტემებში ელექტრონის ყოფაქცევა, როგორც ცნობილია კვანტური მექანიკიდან, აღიწერება ჰამილტონიანით H. მჭიდრო-ბმის მოდელი მიიღება ჰამილტონიანის დისკრეტიზაციით მესერზე. რაც უფრო შევამცირებთ მესერის უჯრედის ზომას, მით უფრო მივუახლოვდებით უწყვეტობას.

"მჭიდრო ბმა" კვანტურ მექანიკური მოდელია და აღწერს დაბალგანზომილებიანი ელექტრონული სისტემების მჭიდროდ ბმული ელექტრონების თვისებებს. ამ მოდელში ელექტრონები მჭიდროდ არიან ბმულნი ატომთან, რომელსაც მიეკუთვნებიან და მათი ურთიერთქმედება შემომსაზღვრელი ატომების პოტენციალთან შეზღუდულია. შედეგად ელექტრონის ტალღური ფუნქცია მსგავსი იქნება ატომის ორბიტალისა, რომელსაც იგი მიეკუთვნება. ელექტრონის ენერჯიაც ასევე ახლოს იქნება ელექტრონის იონიზაციის ენერჯიასთან თავისუფალ ატომში.

გრაფენის გამოჩენამ, რომელიც ნახშირბადის ორგანოზომილიანი ალოტროპიულ მოდიფიკაციას წარმოადგენს (ნახშირბადის ატომებით აგებული ორგანოზომილებიანი კრისტალი), გამოიწვია ამ კრისტალის კვანტურ მექანიკური თვისებების დადგენის ინტერესი.



ნახ.1 გრაფენის სტრუქტურა და მისი სხვა მოდელები

მჭიდრო-ბმის მოდელი ხშირად გამოიყენება ამისათვის. ჩვენც შევხებით გრაფენის ექსკუთხა მესერს, მასზე მოძრავ ელექტრონებს, და შესაბამის ჰამილტონიანს.

4 ერთგანზომილებიანი მესერი

4.1 ფურიეს მწკრივები

ნებისმიერი $(x_0; x_0 + L)$ ინტერვალზე განსაზღვრული ფუნქცია შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი მწკრივის სახით

სადაც

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n f_n(x)$$

$$f_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{2\pi n}{L} x}$$

ინტეგრალი

$$\langle f_m | f_n \rangle = \int_{x_0}^{x_0+L} f_m^+(x) f_n(x) dx$$

ტოლია

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{m,n}$$

რაც იმას ნიშნავს, რომ f_n ფუნქციები ადგენენ ორთონორმირებულ ბაზისს $(x_0; x_0 + L)$ ინტერვალზე. ორთონორმირების და მწკრივად გაშლის გამოყენებით შეგვიძლია გამოვთვალოთ

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+L} f_n^+(x) f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_0+L} f_n^+(x) \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_m f_m(x) dx = \\ &= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_m \int_{x_0}^{x_0+L} f_n^+(x) f_m(x) dx = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_m \delta_{m,n} \end{aligned}$$

საიდანაც ვიღებთ

$$\begin{aligned} C_n &= \int_{x_0}^{x_0+L} f_n^+ f(x) dx \\ &= \int_{x_0}^{x_0+L} \frac{1}{L} e^{-i \frac{2\pi n}{L} x} f(x) dx \end{aligned}$$

მოვახდინოთ ცვლადთა გარდაქმნა

$$x \equiv k \quad \nu = 2\pi k \quad \frac{1}{L} \equiv a \quad n\alpha \equiv x_n$$

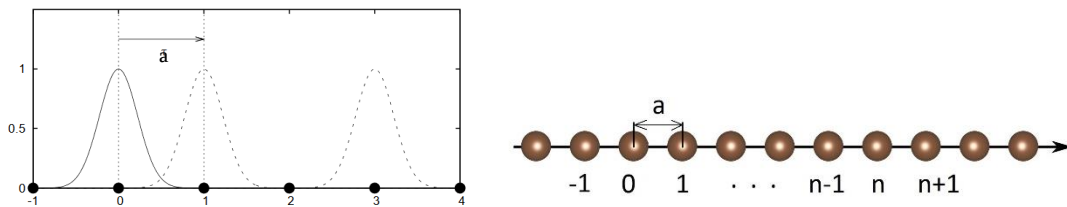
$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{2\pi t_0}^{2\pi t_0 + \frac{2\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{a}}} e^{-ix_n \nu} \frac{f(\nu)}{\sqrt{2\pi}} d\nu \quad \nu \rightarrow k$$

ბოლოს მივიღებთ

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{a}}} \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ix_n k} f(k) dk$$

C_n -ს ვუწოდოთ გაქრობის ოპერატორი n კვანძზე, ხოლო მისი ერმიტულად შეუღლებული ოპერატორი C_n^+ იქნება გაჩენის ოპერატორი n კვანძზე. უფრო კარგად რომ დავინახოთ რატომ ვიღებთ ამ შუალედზე ინტეგრალს განვიხილოთ $(-\infty, +\infty)$ ინტერვალზე განსაზღვრული $\tilde{f}(k)$ ფუნქცია, მაშინ

$$\begin{aligned} C_n &= \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{a}}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ix_n k} \tilde{f}(k) dk \\ &= \dots + \int_{k_0 - \frac{2\pi}{a}}^{k_0} e^{-ix_n k} \tilde{f}(k) dk + \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ix_n k} \tilde{f}(k) dk + \int_{k_0 + \frac{2\pi}{a}}^{k_0 + \frac{4\pi}{a}} e^{-ix_n k} \tilde{f}(k) dk + \int_{k_0 + \frac{4\pi}{a}}^{k_0 + \frac{8\pi}{a}} e^{-ix_n k} \tilde{f}(k) dk + \dots = \\ &= \dots + \int_{k_0 - \frac{2\pi}{a}}^{k_0} e^{-ix_n(k + \frac{2\pi}{a})} \tilde{f}(k + \frac{2\pi}{a}) dk + \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ix_n k} \tilde{f}(k) dk + \int_{k_0 + \frac{2\pi}{a}}^{k_0 + \frac{4\pi}{a}} e^{-ix_n(k - \frac{2\pi}{a})} \tilde{f}(k - \frac{2\pi}{a}) dk + \\ &\quad + \int_{k_0 + \frac{4\pi}{a}}^{k_0 + \frac{8\pi}{a}} e^{-ix_n(k - \frac{4\pi}{a})} \tilde{f}(k - \frac{4\pi}{a}) dk + \dots \\ &= \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{ikx_n} \sum_i \tilde{f}(k - \frac{2\pi}{a}i) \\ &\quad f(k) = \sum_i \tilde{f}(k - \frac{2\pi}{a}i) \end{aligned}$$



ნახ.2 1D მესერი

ერთგანზომილებიან მესერზე ელექტონის მოძრაობის შესაბამისი ჰამილტონიანი აღიწერება შემდეგი ფორმულით

$$H = -t \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_{n+1}^+ C_n + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n^+ C_{n+1} \right)$$

სადაც პირველი წევრი აღწერს ელექტრონის მარჯვნივ გადახტომას ხოლო მეორე წევრი, რომელიც პირველის ერმიტულად შეუღლებულია, მარცხნიდან მარჯვნივ გადახტომას. გამოვთვალოთ პირველი წევრი

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_{n+1}^+ C_n &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\frac{2\pi}{a}} \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ix_{n+1}k} f^+(k) dk \int_{k'_0}^{k'_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{+ix_n k'} f(k') dk' \\ &= \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ika} f^+(k) f(k) dk \end{aligned}$$

მეორე წევრი იქნება პირველის ერმიტულად შეუღლებული და ჰამილტონიანისთვის მივიღებთ

$$\begin{aligned} H &= -t \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ika} f^+(k) f(k) dk - t \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{ika} f^+(k) f(k) dk \\ &= \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} E(k) f^+(k) f(k) dk \end{aligned}$$

ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრისთვის მივიღებთ

$$E(k) = -t(e^{-ika} + e^{ika}) = -2t \cos(ka)$$

სადაც k არის ელექტრონის იმპულსი, ხოლო a მესერის მუდმივა (მანძილი კვანძებს შორის).

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \dots$$

$$E(k) = -2t \left(1 - \frac{k^2 a^2}{2}\right) = -2t + \frac{k^2}{\left(\frac{1}{a^2 t}\right)}$$

$$E = \frac{P^2}{2m} \quad m = \frac{1}{2a^2 t}$$

თუ გავითვალისწინებთ მასურ წევრს, მივიღებთ

$$\begin{aligned} H &= -t \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_{n+1}^+ C_n + h.c. \right) + \mu^2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n^+ C_n \\ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n^+ C_n &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\frac{2\pi}{a}} \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{-ix_n k} f^+(k) dk \int_{k'_0}^{k'_0 + \frac{2\pi}{a}} e^{+ix_n k'} f(k') dk' \\ &= \int_{k_0}^{k_0 + \frac{2\pi}{a}} \int_{k'_0}^{k'_0 + \frac{2\pi}{a}} \frac{1}{\frac{2\pi}{a}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-ix_n(k-k')} f^+(k) f(k') dk dk' \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-ix_n(k-k')} &= \delta(k-k') \\ &= \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} f^+(k)f(k)dk \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H &= -t \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} e^{-ika} f^+(k)f(k)dk - t \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} e^{ika} f^+(k)f(k)dk + \mu^2 \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} f^+(k)f(k)dk \\ &= \int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} [-t(e^{-ika} + e^{ika}) + \mu^2] f^+(k)f(k)dk \end{aligned}$$

ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრისთვის, მასური წევრის გათვალისწინებით, მივიღებთ

$$E(k) = -t(e^{-ika} + e^{ika}) + \mu^2 = -2t\cos(ka) + \mu^2 = -2t + \frac{k^2}{\frac{1}{a^2t}} + \mu^2$$

5 ოთხკუთხა მესერი

5.1 ბრილუინის ზონა

მესერის ერთეულოვანი უჯრედი ეწოდება ისეთ მოცულობას (3D) ან ფართობს (2D) უჯრედისას, რომლის შესაბამისი მესერის ბაზისური ვექტორებით გადაადგილებით მთელს სივრცეს დაფარავს. უმცირესი ფართობის მქონე ერთეულოვან უჯრედს პრიმიტიული უჯრედი ეწოდება. დუალური მესერი მოცემული მესერისა დუალურ სივრცეში არის ისეთი წერტილებისგან შემდგარი, რომელთა ვექტორი \vec{k} აკმაყოფილებს პირობას

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1$$

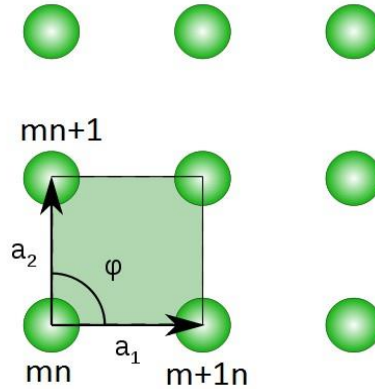
სადაც \vec{k} არის მოცემული მესერის ნებისმიერი ვექტორი.

ვთქვათ თუ $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ არიან მოცემული მესერის საბაზისო ვექტორები და დუალური მესერის საბაზისო ვექტორებია $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ მაშინ ისინი აკმაყოფილებენ პირობას

$$a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij}$$

დუალური მესერის პრიმიტიულ უჯრედს ბრილუინის ზონას უწოდებენ. ჩვენ ელექტრონის ენერგეტიკულ სპექტრს ზუსტად ბრილუინის ზონაში განვიხილავთ.

5.2 მართკუთხა მესერი



ნახ.2 2D მესერის სტრუქტურა

$$\vec{a}_1 = (a_1, 0) \quad \vec{a}_2 = (0, a_2)$$

$$\vec{x}_{m,n} = (n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2) = (n(a_1, 0) + m(0, a_2))$$

m,n კვანძიდან ელექტრონის გაქრობის ოპერატორს ექნება შემდეგი სახე

$$\begin{aligned} C_{m,n} &= \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{a_1}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{a_2}}} \int_{k_{01}}^{k_{01} + \frac{2\pi}{a_1}} \int_{k_{02}}^{k_{02} + \frac{2\pi}{a_2}} e^{ik_1 a_1 n} e^{ik_2 a_2 m} f(k_1, k_2) dk_1 dk_2 \\ &= \frac{1}{\Omega} \int \int e^{i\vec{k}\vec{x}_{m,n}} f(\vec{k}) d\vec{k} \end{aligned}$$

ჩვენ \vec{k} შეგვიძლია წავანაცვლოთ \vec{b}_1 და \vec{b}_2 ვექტორებით, ამით არაფერი არ შეიცვლება

$$C_{m,n} = \frac{1}{\Omega} \int \int e^{i(\vec{k} + i\vec{b}_1 + j\vec{b}_2)\vec{x}_{m,n}} f(\vec{k} + i\vec{b}_1 + j\vec{b}_2) d\vec{k}$$

ერთგანზომილებიანი მესერის ანალოგიით

$$f(\vec{k} + i\vec{b}_1 + j\vec{b}_2) = \sum_{sl} \tilde{f}(\vec{k} + s\vec{b}_1 + l\vec{b}_2)$$

თუ ჯამში ინტეგრალის საზღვრებს ყველაგან გადავანაცვლებთ $i\vec{b}_1$ -ით და $j\vec{b}_2$ -ით არაფერი შეიცვლება ჯამში, უსასრულო წევრების ქონის გამო და მივიღებთ, რომ

$$f(\vec{k} + i\vec{b}_1 + j\vec{b}_2) = f(\vec{k})$$

ხოლო

$$e^{i(\vec{k}+i\vec{b}_1+j\vec{b}_2)\vec{x}_{m,n}} = e^{i\vec{k}\vec{x}_{m,n}}$$

რადგან

$$a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$H = -t \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{m,n+1}^+ C_{m,n} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_{m+1,n}^+ C_{m,n} + h.c. \right)$$

ელექტრონის მოძრაობას მართკუთხა მესერზე აღწერს ჰამილტონიანი

სადაც პირველი წევრი ელექტრონის მარჯვნივ გადახტომას შეესაბამება, მეორე ზემოთ გადახტომას და მათი ერმიტულად შეუღლებული წევრები შესაბამისად მარცხნივ და ქვემოთ გადახტომას.

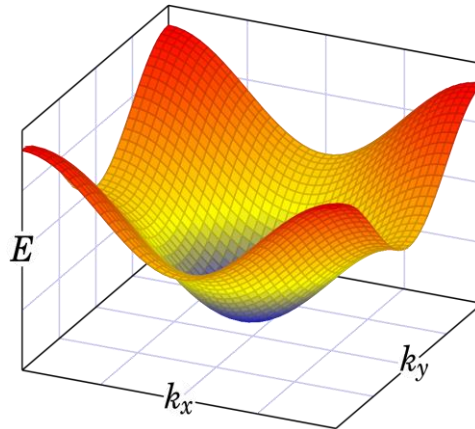
$$\begin{aligned} \sum_{m,n} C_{m,n+1}^+ C_{m,n} &= \sum_{m,n} \frac{1}{\Omega} \int \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{-ik_1 a_1 (n+1)} e^{-ik_2 a_2 m} f^+(\vec{k}) e^{ik'_1 a_1 n} e^{ik'_2 a_2 m} f(\vec{k}') \\ &= \int d\vec{k} d\vec{k}' \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_n e^{-ik_1 a_1 n} e^{ik'_1 a_1 n} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m e^{-ik_2 a_2 m} e^{ik'_2 a_2 m} e^{ik_1 a_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}') \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_n e^{-ik_1 a_1 n} e^{ik'_1 a_1 n} = \delta(k_1 - k'_1) \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m e^{-ik_2 a_2 m} e^{ik'_2 a_2 m} = \delta(k_2 - k'_2) \\ &= \int e^{-ik_1 a_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} \end{aligned}$$

ანალოგიურად

$$\begin{aligned} \sum_{m,n} C_{m+1,n}^+ C_{m,n} &= \int e^{-ik_2 a_2} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} \\ H &= -t \left[\int e^{-ik_1 a_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} + \int e^{-ik_2 a_2} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} + \right. \\ &\quad \left. + \int e^{ik_1 a_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} + \int e^{ik_2 a_2} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} \right] \\ &= 2t \int [\cos(k_1 a_1) + \cos(k_2 a_2)] f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} \end{aligned}$$

ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრი გვექნება

$$E(k) = -2t[\cos(k_1 a_1) + \cos(k_2 a_2)]$$

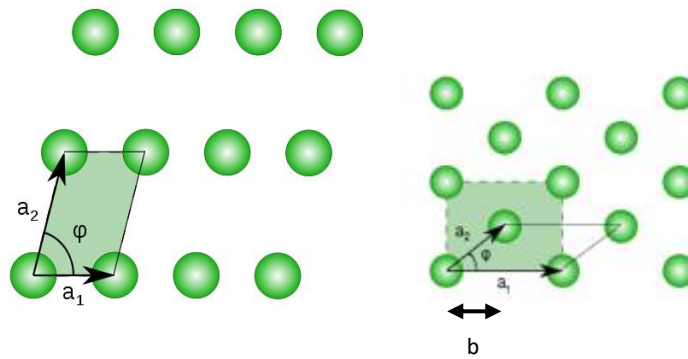


ნახ. 3 ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრი $E(\vec{k})$

$$E(k) = 2t\left(1 - \frac{k_1^2 a_1^2}{2} + 1 - \frac{k_2^2 a_2^2}{2}\right) = -4t + tk_1^2 a_1^2 - tk_2^2 a_2^2$$

$$tk_1^2 a_1^2 = \frac{k_1^2}{2m} \Rightarrow m = \frac{1}{2ta_1^2}$$

5.3 დახრილი მესერი



ნახ.4 ორგანოზომილებიანი დახრილი მესერი

$$\vec{a}_1 = (a_1, 0)$$

$$\vec{a}_2 = (b, a_2) \quad b = a_2 \cos \varphi$$

$$x_{m,n}^{\vec{a}} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = n(a_1, 0) + m(b, a_2)$$

$$C_{m,n} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int \int e^{ik_1 a_1 n} e^{ik_2 a_2 m} e^{ik_1 b m} f(\vec{k}) d\vec{k}$$

$$\sum_{m,n} C_{m,n+1}^+ C_{m,n} = \sum_{m,n} \frac{1}{\Omega} \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{-ik_1 a_1 n} e^{-ik_2 a_2 m} e^{-ik_1 b m} f^+(\vec{k}) e^{ik_1' a_1 n} e^{ik_2' a_2 m} e^{ik_1' b m} f(\vec{k}')$$

$$= \int d\vec{k} d\vec{k}' \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_n e^{-ik_1 a_1 n} e^{ik_1' a_1 n} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m e^{-ik_2 a_2 m} e^{ik_2' a_2 m} e^{-ik_1 b m} e^{ik_1' b m} e^{-ik_1 a_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}')$$

$$= \int e^{-ik_1 a_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k}$$

$$\sum_{m,n} C_{m,n+1}^+ C_{m,n} = \int e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k}$$

$$\sum_{m,n} C_{m+n}^+ C_{m,n} = \int e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k}$$

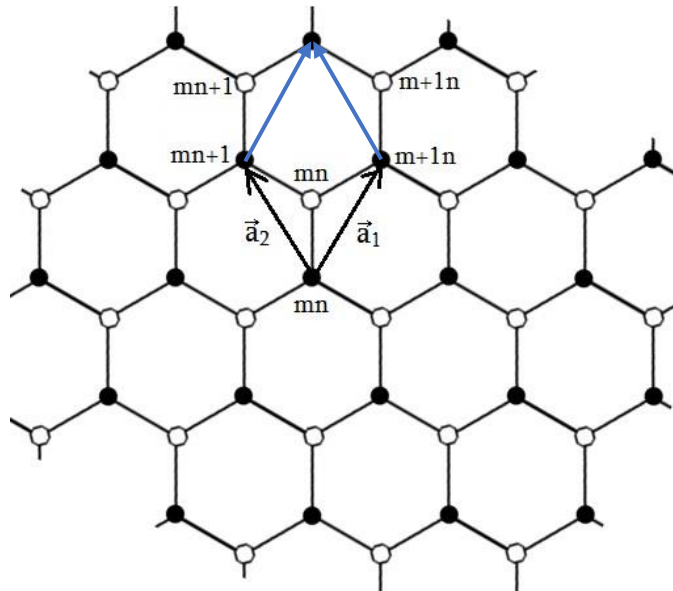
$$H = -t \int [e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\vec{a}_2}] f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k}$$

ჩვენ მართკუთხა მესერის ანალოგიურ ფორმულას მივიღებთ ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრისათვის, მაგრამ აქ უკვე \vec{a}_2 განსხვავებული იქნება მართკუთხა მესერის \vec{a}_2 -სგან.

$$E(\vec{k}) = 2t[\cos(\vec{k}\vec{a}_1) + \cos(\vec{k}\vec{a}_2)]$$

6 ექვსკუთხა მესერი

ახლა განვიხილოთ ექვსკუთხა მესერი, რადგან ამ სისტემის ასაღწერად ვერ მოვძებნით ისეთ ორ ურთიერთდამოუკიდებელ ვექტორს, რომელთა საშუალებით მოვივლით მესერის ყველა წერტილს, ამიტომ ეს წერტილები დავყოთ თეთრ და შავ წერტილებად, როგორც ეს ნახ.5-ზეა ნაჩვენები



ნახ.5 ექვსკუთხა (ფიჭური) მესერი

ახლა უკვე ორი ნახაზზე გამოსახული \vec{a}_1 და \vec{a}_2 ვექტორებით შევძლებთ მოვიაროთ ყველა შავი და თეთრი წერტილი. m, n ინდექსების მქონე წერტილის აღმწერი ვექტორი იქნება

$$\vec{x}_{m,n} = \vec{a}_1 m + \vec{a}_2 n$$

შესაბამისად $m+1, n$ ინდექსის მქონე წერტილის

$$\vec{x}_{m+1,n} = \vec{a}_1 m + \vec{a}_2 n + \vec{a}_1$$

და $m, n+1$ ინდექსის მქონე წერტილის

$$\vec{x}_{m,n+1} = \vec{a}_1 m + \vec{a}_2 n + \vec{a}_2$$

m, n ინდექსის მქონე თეთრი წერტილის გაქრობის ოპერატორს ექნება შემდეგი სახე

$$C_{om,n} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_{m,n}} f_o(\vec{k}) d\vec{k}$$

ხოლო m, n ინდექსის მქონე შავი წერტილის გაქრობის ოპერატორს

$$C_{\bullet m, n} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int e^{i\vec{k}\vec{x}_{m, n}} f_{\bullet}(\vec{k}) d\vec{k}$$

ელექტორნის ამ მესერზე მოძრაობის შესაბამისი ჰამილტონიანი იქნება

$$H = -t \left(\sum_{m, n} C_{\bullet m, n}^+ C_{\circ m, n} + \sum_{m, n} C_{\bullet m+1, n}^+ C_{\circ m, n} + \sum_{m, n} C_{\bullet m, n}^+ C_{\circ m, n+1} \right) + h.c.$$

სადაც

$$\begin{aligned} \sum_{m, n} C_{\bullet m, n}^+ C_{\circ m, n} &= \sum_{m, n} \int d\vec{k} d\vec{k}' \underbrace{\frac{1}{\Omega} e^{-i\vec{k}\vec{x}_{m, n}} e^{i\vec{k}'\vec{x}_{m, n}}}_{\delta(\vec{k}-\vec{k}')} f_{\bullet}^+(\vec{k}) f_{\circ}(\vec{k}') \\ \sum_{m, n} C_{\bullet m, n}^+ C_{\circ m, n} &= \int f_{\bullet}^+(\vec{k}) f_{\circ}(\vec{k}') d\vec{k} d\vec{k}' \end{aligned}$$

ანალოგიურად მივიღებთ, რომ

$$\begin{aligned} \sum_{m, n} C_{\bullet m+1, n}^+ C_{\circ m, n} &= \int e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} f_{\bullet}^+(\vec{k}) f_{\circ}(\vec{k}') d\vec{k} d\vec{k}' \\ \sum_{m, n} C_{\bullet m, n}^+ C_{\circ m, n+1} &= \int e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} f_{\bullet}^+(\vec{k}) f_{\circ}(\vec{k}') d\vec{k} d\vec{k}' \end{aligned}$$

ჰამილტონიანი მიიღებს შემდეგ სახეს

$$H = \int [1 + e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\vec{a}_2}] f_{\bullet}^+(\vec{k}) f_{\circ}(\vec{k}') d\vec{k} + [1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\vec{a}_2}] f_{\circ}^+(\vec{k}) f_{\bullet}(\vec{k}') d\vec{k}$$

შემოვიღოთ ორ კომპონენტური მატრიცა

$$\Psi(\vec{k}) = \begin{pmatrix} f_{\circ}(\vec{k}) \\ f_{\bullet}(\vec{k}) \end{pmatrix}$$

რომლის ერმიტულად შეუღლებული იქნება

$$\Psi^+(\vec{k}) = (f_{\circ}(\vec{k}) \quad f_{\bullet}(\vec{k}))$$

მაშინ ჰამილტონიანი ასე გადაიწერება

$$H = \int \Psi^+(\vec{k}) \mathcal{H} \Psi(\vec{k}) d\vec{k}$$

სადაც

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \psi(\vec{k}) \\ \psi^+(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}$$

ხოლო

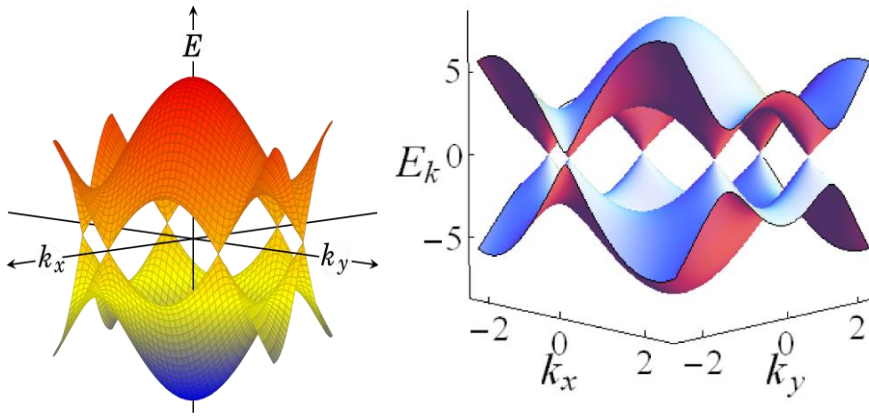
$$\psi(\vec{k}) = 1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\vec{a}_2}$$

თუ მოვახდენთ \mathcal{H} -ის დიაგონალიზაციას, რისთვისაც ვიპოვით შესაბამის საკუთარ რიცხვებს

$$\lambda = \pm\sqrt{\psi\psi^+}$$

$$\lambda = \pm\sqrt{3 + 2\cos(\vec{k}\vec{a}_1) + 2\cos(\vec{k}\vec{a}_2) + 2\cos(\vec{k}\vec{a}_1 - \vec{k}\vec{a}_1)}$$

მივიღებთ ელექტრონის ენერგეტიკულ სპექტრს



ნახ.6 ექვსკუთხა (ფიჭური) მესერის ენერგეტიკული სპექტრი

ერთ-ერთი ნული იქნება $\vec{K} = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$ წერტილში, ამიტომ გავშალოთ λ^2 ამ წერტილის მახლობლად წერტილში $\vec{k} = \vec{K} + \Delta\vec{k}$

$$\begin{aligned} \lambda^2(\frac{4\pi}{3a} + \Delta k_x, \Delta k_y) &= 1 + 4\cos(\frac{2\pi}{3} + \frac{a}{2}\Delta k_x)\cos(\frac{\sqrt{3}a}{2}\Delta k_y) + 4\cos(\frac{2\pi}{3} + \frac{a}{2}\Delta k_x)^2 \\ \lambda^2(\frac{4\pi}{3a} + \Delta k_x, \Delta k_y) &= 1 + 4(-\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{4}a\Delta k_x + \frac{a^2(\Delta k_x)^2}{16} + \frac{3a^2(\Delta k_y)^2}{16} + \\ &+ 4(\frac{1}{4} + \frac{3}{16}a^2(\Delta k_x)^2 + \frac{\sqrt{3}}{4}(\Delta k_x)^2 - \frac{a^2}{16}(\Delta k_x)^2) = \\ &= \frac{3a^2}{4}((\Delta k_x)^2 + (\Delta k_y)^2) = \frac{3a^2}{4}|\Delta\vec{k}|^2 \end{aligned}$$

$$E^2 = \frac{3a^2}{4} |\Delta \vec{k}|^2$$

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \Rightarrow E^2 = \frac{3a^2}{4\hbar^2} |\vec{p}|^2 \Rightarrow c^2 = \frac{3a^2}{4\hbar^2}$$

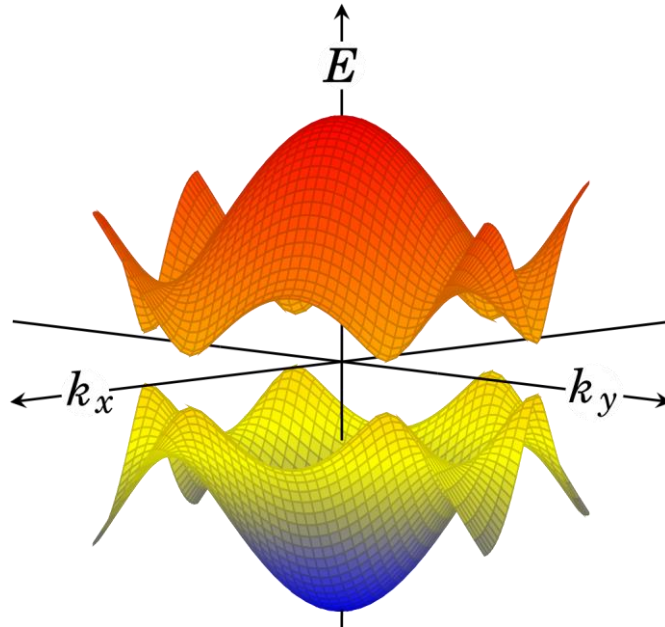
სადაც c არის სიგნალის გავრცელების სიჩქარე.

თუ გავითვალისწინებთ მასურ წევრებს მაშინ ჰამილტონიანი მიიღებს სახეს

$$H = -t \left(\sum_{m,n} C_{\bullet m,n}^+ C_{\circ m,n} + \sum_{m,n} C_{\bullet m+1,n}^+ C_{\circ m,n} + \sum_{m,n} C_{\bullet m,n}^+ C_{\circ m,n+1} \right) + h.c. +$$

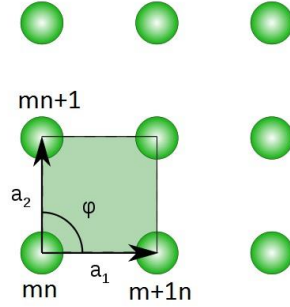
$$+ \eta_1 \sum_{m,n} C_{\circ m,n}^+ C_{\circ m,n} + \eta_2 \sum_{m,n} C_{\bullet m,n}^+ C_{\bullet m,n}$$

ამ წევრთა გამო ენერგეტიკული სპექტრი შეიცვლის სახეს, გაუჩნდება ღრეჩო



ნახ.7 ექვსკუთხა (ფიჭური) მესერის ენერგეტიკული სპექტრი მასური წევრის გათვალისწინებით

7 სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება



დავუბრუნდეთ მართკუთხა მესერს, შემოვიღოთ ელექტრონის მახასიათებელი სპინი. გამვიხილოთ შემთხვევები როდესაც ელექტრონი გადახტომისას სპინის მიმართულებას იცვლის და მისი შესაბამისი ჰამილტონიანია

$$H = (\alpha \sum_{m,n} C_{m+1,n\downarrow}^+ C_{m,n\uparrow} + \beta \sum_{m,n} C_{m,n+1\downarrow}^+ C_{m,n\uparrow}) + h.c. +$$

$$+(\gamma \sum_{m,n} C_{m+1,n\uparrow}^+ C_{m,n\downarrow} + \eta \sum_{m,n} C_{m,n+1\uparrow}^+ C_{m,n\downarrow}) + h.c.$$

შემოვიღოთ ორკომპონენტური მატრიცა

$$\Psi_{m,n} = \begin{pmatrix} C_{m,n\uparrow} \\ C_{m,n\downarrow} \end{pmatrix}$$

მაშინ ჰამილტონიანი კი გადაიწერება

$$H = \sum_{m,n} \Psi_{m+1,n}^+ X \Psi_{m,n} + h.c. + \sum_{m,n} \Psi_{m,n+1}^+ Y \Psi_{m,n} + h.c.$$

სადაც X და Y

$$X = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \gamma & 1 \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ \eta & 1 \end{pmatrix}$$

როგორც ვიცით კვანტური მექანიკიდან, როდესაც ვიხილავთ ნაწილაკს მაგნეტურ ველში მისი აღმწერი ჰამილტონიანი იღებს შემდეგ სახეს

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \quad \rightarrow \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - e\vec{A})^2$$

მაგნიტური ველის ჩართვა მესერის მოდელებში ხდება შემდეგი შენაცვლებით

$$\Psi^+(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1) \quad \rightarrow \quad e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} e\vec{A} d\vec{l}} \Psi^+(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1)$$

ამ ანალოგიით ვნახოთ როგორ შეიცვლება ჰამილტონიანში გადახტომის აღმწერი წევრი სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ჩართვისას.

როგორც ვიცით კვანტური მექანიკიდან სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების ჩართვისას ჰამილტონიანი იღებს შემდეგ სახეს

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \vec{\sigma}(\hat{p} \times \vec{E})$$

განვიხილოთ z მიმართულების მქონე ელექტრული ველი $\vec{E} = (0, 0, E)$, მაშინ

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha(\sigma_x p_y - p_x \sigma_y)$$

ჰამილტონიანი გადავწეროთ სხვა სახით

$$H' = \frac{1}{2m}(p_x + A\sigma_y)^2 + \frac{1}{2m}(p_y + B\sigma_x)^2$$

A და B კოეფიციენტების პოვნის შედეგ მივიღებთ რომ

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2m}(p_x - \alpha m \sigma_y)^2 + \frac{1}{2m}(p_y + \alpha m \sigma_x)^2 \\ &= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \alpha(p_y \sigma_x + p_x \sigma_y) + 2\alpha^2 m^2 \end{aligned}$$

მივიღეთ რომ H ანალოგიურია H' ის, ამიტომ H შეგვიძლია შემდეგნაირად ჩავწეროთ

$$H = \frac{1}{2m}(\hat{p} + \vec{B})$$

სადაც

$$B_x = -\alpha m \sigma_y \quad B_y = \alpha m \sigma_x \quad \Rightarrow \quad B_n = -\alpha m \epsilon_{ni} \sigma_i$$

მაგნიტური ველის ანალოგიურად მოვახდინოთ შემდეგი შენაცვლება

$$\Psi^+(\vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1) \rightarrow \Psi^+(\vec{r}_2)e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{B} d\vec{l}} \Psi(\vec{r}_1)$$

განვიხილოთ რას უდრის $e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{B} d\vec{l}}$

$$\int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{B} d\vec{l} = \vec{B}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \vec{B}\vec{R}$$

$$B_n = -\alpha m \epsilon_{ni} \sigma_i \quad \epsilon_{ni} \sigma_i \equiv b_n$$

$$\begin{aligned} e^{i\vec{c}\vec{b}\vec{R}} &= \sum_n \frac{(i\vec{c}\vec{b}\vec{R})^n}{n!} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n} c^{2n} (\vec{b}\vec{R})^{2n}}{2n!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i \cdot i^{2n} c^{2n+1} (\vec{b}\vec{R})^{2n+1}}{(2n+1)!} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\vec{b}\vec{R})^{2n} &= \vec{R}^{2n} & (\vec{b}\vec{R})^{2n+1} &= \vec{R}^{2n}(\vec{b}\vec{R}) \\
e^{i\vec{c}\vec{b}\vec{R}} &= \cos(c|\vec{R}|) + i\frac{\vec{b}\vec{R}}{|\vec{R}|}\sin(c|\vec{R}|) \\
c|\vec{R}| &\equiv \theta \\
e^{i\vec{c}\vec{b}\vec{R}} &= \cos\theta + i\frac{\vec{b}\vec{R}}{|\vec{R}|}\sin\theta
\end{aligned}$$

ჰამილტონიანისთვის მივიღებთ

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{m,n} \Psi_{m+1,n}^+ [\cos\theta + i\sigma_y \sin\theta] \Psi_{m,n} + h.c. \\
&+ \sum_{m,n} \Psi_{m,n+1}^+ [\cos\theta - i\sigma_x \sin\theta] \Psi_{m,n} + h.c. \\
H &= \cos\theta \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) - i\sin\theta \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} f^+(\vec{k}) \sigma_y f(\vec{k}) \\
&+ \cos\theta \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} f^+(\vec{k}) f(\vec{k}) + i\sin\theta \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} f^+(\vec{k}) \sigma_x f(\vec{k}) \\
H &= \int d\vec{k} \mathcal{H} f^+(\vec{k}) f(\vec{k})
\end{aligned}$$

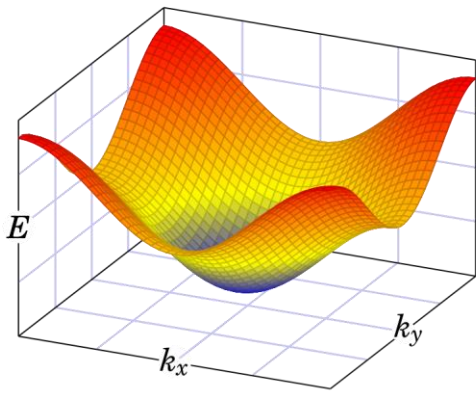
სადაც

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \cos\theta e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} - i\sin\theta e^{-i\vec{k}\vec{a}_1} \sigma_y + \cos\theta e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} + i\sin\theta e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} \sigma_x \\
&+ \cos\theta e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + i\sin\theta e^{i\vec{k}\vec{a}_1} \sigma_y + \cos\theta e^{i\vec{k}\vec{a}_2} - i\sin\theta e^{i\vec{k}\vec{a}_2} \sigma_x \\
&= 2\cos\theta \cos(\vec{k}\vec{a}_1) + 2\cos\theta \cos(\vec{k}\vec{a}_2) + 2\sin\theta \sin(\vec{k}\vec{a}_2) \sigma_x + 2\sin\theta \sin(\vec{k}\vec{a}_1) \sigma_y \\
\mathcal{H} &= \begin{pmatrix} 2\cos\theta \cos(k_x a_1) + 2\cos\theta \cos(k_y a_2) & 2\sin\theta \sin(k_y a_2) + i2\sin\theta \sin(k_x a_1) \\ 2\sin\theta \sin(k_y a_2) - i2\sin\theta \sin(k_x a_1) & 2\cos\theta \cos(k_x a_1) + 2\cos\theta \cos(k_y a_2) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

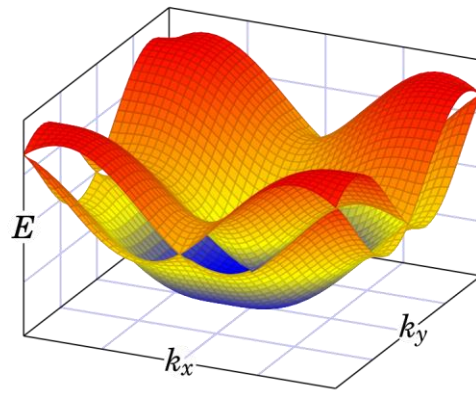
რომლის საკუთარი მნიშვნელობები მოგვცემს ელექტრონის ენერგეტიკულ სპექტრს, დისპერსიულ თანაფარდობას:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \cos\theta \cos(k_x a_1) + \cos\theta \cos(k_y a_2) + \sin\theta \sqrt{\sin(k_x a_1)^2 + \sin(k_y a_2)^2} \\
\lambda_2 &= \cos\theta \cos(k_x a_1) + \cos\theta \cos(k_y a_2) - \sin\theta \sqrt{\sin(k_x a_1)^2 + \sin(k_y a_2)^2}
\end{aligned}$$

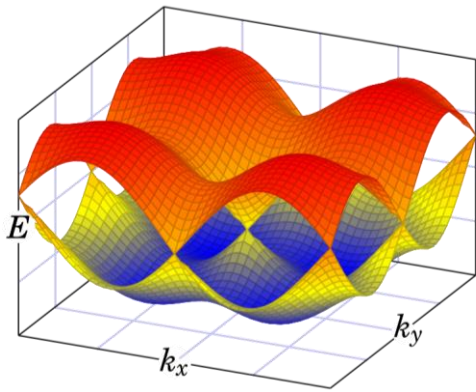
იმისდა მიხედვით თუ როგორია θ სპექტრი იცვლის სახეს



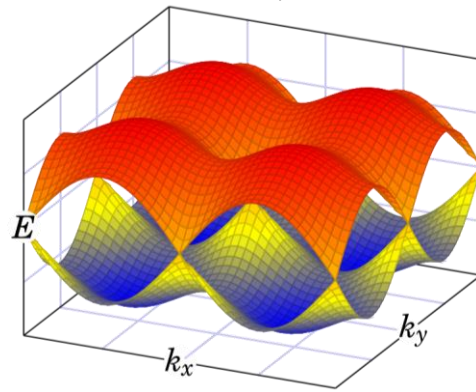
5sb. 8 $\theta = 0$



5sb. 9 $\theta = \pi/4$



5sb. 10 $\theta = \pi/3$



5sb. 11 $\theta = \pi/2$

8 გამოყენებული ლიტერატურა

1. Behnaz Gharekhanlou and Sina Khorasiani, An Overview of Tight-Binding Method for Two-Dimensional Carbon Structures, 2011
2. W.E. Pickett, "Tight-Binding" Method: Linear Combination of Atomic Orbitals, 1999
3. Guido van Miert, Tight-binding theory of spin-orbit coupling in graphynes, 2014
4. Michel van Veenendaal, Tight-Binding Method
5. Mervyn Roy, The Tight Binding Method, 2015