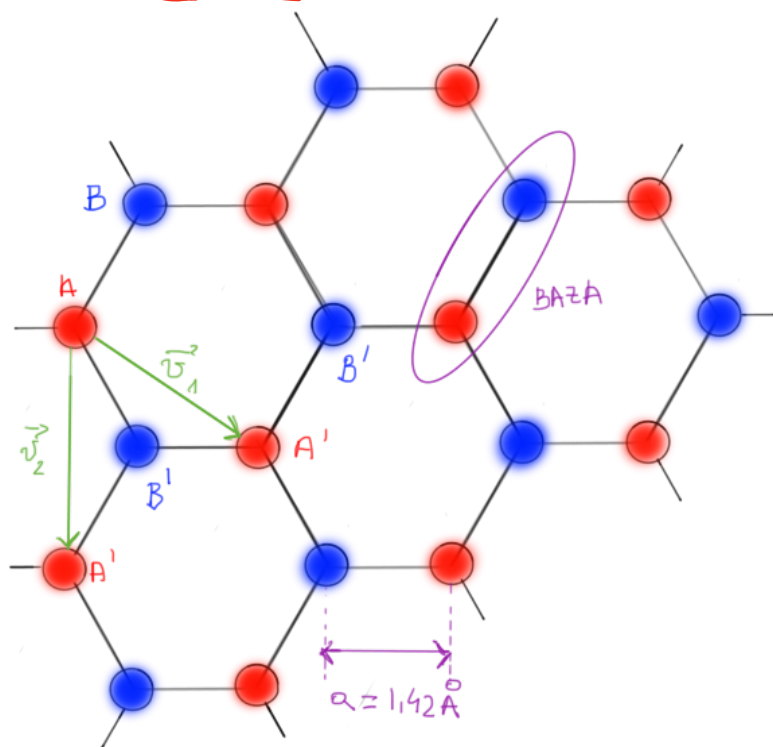


## Zad. 1 (ćwiczenia 11)

czwartek, 26 stycznia 2017

10:17

### Grafen



Grafen jest dwuwymiarowym kryształem zbudowanym z atomów węgla ułożonych w strukturę plastra miodu.

A i B nie są równoważnymi węzłami sieci (inne uporządkowanie sąsiadów). Nie możemy utworzyć sieci tylko przez translację prymitywną tylko jednego z węzłów.

Musimy rozważyć bazę składającą się z A i B.

Wektory translacji prymitywnej:

$$\vec{v}_1 = \left( \frac{3}{2} a_1, -\frac{\sqrt{3}}{2} a_1, 0 \right)$$

$$\vec{v}_2 = \left( 0, -\sqrt{3} a_1, 0 \right)$$

$$\vec{v}_3 = \left( 0, 0, 1 \right)$$

Sieć krystaliczna ma swoje odwzorowanie w przestrzeni odwrotnej, która jest abstrakcyjną siecią w przestrzeni Fouriera (czyli przestrzeni wektorów falowych).

Wektory sieci rzeczywistej są powiązane z wektorami sieci odwrotnej relacją:

$$\vec{b}_i = \epsilon_{ijk} 2\pi \frac{\vec{v}_j \times \vec{v}_k}{|\vec{v}_i \cdot (\vec{v}_j \times \vec{v}_k)|}$$

zatem

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{v}_2 \times \vec{v}_3}{|\vec{v}_1 \cdot (\vec{v}_2 \times \vec{v}_3)|} = \frac{4\pi}{3a} (-1, 0, 0)$$

$$V = |\vec{v}_1 \cdot (\vec{v}_2 \times \vec{v}_3)| = \frac{3\sqrt{2}}{2} a^2 - \text{objętość komórki elementarnej}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} (\sqrt{3}, 3, 0)$$

**Strefa Brillouina** (a właściwie to pierwsza strefa Brillouina) jest komórką Wignera-Seitza w sieci odwrotnej, tzn. powstaje poprzez poprowadzenie z danego węzła odcinków łączących go z najbliższymi sąsiadami, a następnie przecięciu ich w połowie długości prostopadłymi płaszczyznami.

Konstruujemy operatory pola w tym przypadku:

$$\hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) c_{\vec{k}\sigma} = \hat{\Psi}_\sigma^A(\vec{r}) + \hat{\Psi}_\sigma^B(\vec{r}) =$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{anihilacja pętnej bazy}}$ 
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{operatory pola dla podsieci}}$

$$\approx \sum_{\vec{k} \in A} \varphi_{\vec{k}}^A(\vec{r}) a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k} \in B} \varphi_{\vec{k}}^B(\vec{r}) b_{\vec{k}\sigma}$$

$\uparrow$  przybliżenie ciastego wiązania

$\swarrow$  zlokalizowane funkcje falowe

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{H} \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) =$$

$$= \sum_{\sigma} \left[ \int d^3r \left( \hat{\psi}_{\sigma}^A + \hat{H} \hat{\psi}_{\sigma}^A + \hat{\psi}_{\sigma}^B + \hat{H} \hat{\psi}_{\sigma}^B + \hat{\psi}_{\sigma}^{A+} + \hat{H} \hat{\psi}_{\sigma}^B + \hat{\psi}_{\sigma}^B + \hat{H} \hat{\psi}_{\sigma}^A \right) \right] =$$

$$= \hat{H}_{AA} + \hat{H}_{BB} + \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BA}$$

Funkcje Wanniera (G. U. Wannier, *Phys. Rev.* **52** (1937) 191)

$\int d^3r \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$ , gdzie  $\phi_i(\vec{r})$  - f. Wanniera

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \phi_i(\vec{r}) \end{array} \right.$$

$N$  - l. węzłów sieci

$\vec{R}_i$  - wektor położenia i-tego węzła

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  - funkcja fali Blocha

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r}), \text{ gdzie } u(\vec{r} + \vec{R}_n) = u(\vec{r})$$

Hamiltonian w reprezentacji II kwantyzacji:

$$\int d^3r \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{H} \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{i,j \in A} \underbrace{\int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r})}_{\epsilon_A} a_i^{\dagger} a_j +$$

$$+ \sum_{i,j \in B} \underbrace{\int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r})}_{\epsilon_B} b_i^{\dagger} b_j +$$

$$+ \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} \underbrace{\int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r})}_{t_{ij}} a_i^{\dagger} b_j +$$

$$+ \sum_{\substack{i \in B \\ j \in A}} \underbrace{\int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r})}_{t_{ji}} b_i^{\dagger} a_j =$$

$$\approx \sum_{i \in A} \epsilon_A a_i^\dagger a_i + \sum_{i \in B} \epsilon_B b_i^\dagger b_i + \sum_{\substack{i \in B \\ \langle i, j \rangle}} (t_{ij} a_i^\dagger b_j + t_{ji} b_i^\dagger a_j)$$

↑  
 przybliżenie  
 cięskiego  
 wierz. zanied  
 ( f. Wanniera  
 sea zlokalizowane )

Przechodzimy do reprezentacji operatorów pola wykorzystujących funkcje Blocha:

$$\begin{cases} \psi_A(\vec{r}) = \sum_{i \in A} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) a_{\vec{k}} \\ \psi_B(\vec{r}) = \sum_{i \in B} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) b_{\vec{k}} \end{cases}$$

$$\hat{H}_{AA} = \sum_{i \in A} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_i} \int d^3r \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}'} =$$

translacyjna niezmienniczość

$$\rightarrow \vec{k} = \vec{k}'$$

$$= \sum_{\vec{k}} \sum_{i \in A} \frac{1}{N} \int d^3r \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} =$$

↑ suma po węzłach da ich ilość

$$= \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$$

Analogicznie:  $\hat{H}_{BB} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}$

$$\hat{H}_{AB} = \sum_{i \in A} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i^A} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{R}_j^B} \int d^3r \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} =$$

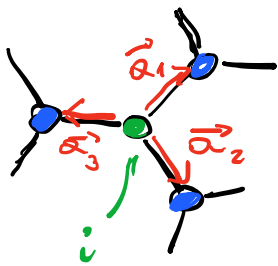
$t_{\vec{k}}$

$$= \sum_{\substack{i \in A \\ \langle j \rangle \in B}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i^A - \vec{r}_j^B)} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_j^B} \int d^3r \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}'} =$$

transformacja  
nieoptymalna  
 $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{a}_j$

$$= \sum_{\vec{k}} \sum_{\langle j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i^A - \vec{r}_j^B)} t_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$$

↑  
dla dowolnego  
wektora podsieci A



$$\vec{a}_1 = \left( \frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} a, 0 \right)$$

$$\vec{a}_2 = \left( \frac{a}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} a, 0 \right)$$

$$\vec{a}_3 = (-a, 0, 0)$$

$$H_{AB} = \sum_{\vec{k}} \left[ e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y \frac{\sqrt{3}}{2} a} e^{-ik_x \frac{a}{2}} e^{ik_y \frac{\sqrt{3}}{2} a} e^{ik_x a} \right] \cdot t_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$$

$$= \sum_{\vec{k}} e^{ik_x a} \left[ 1 + 2 e^{-i \frac{3}{2} k_x a} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_y\right) \right] t_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$$

więc  $V_{\vec{k}}$

$$\hat{H}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}}^+ & b_{\vec{k}}^+ \\ V_{\vec{k}}^* & \epsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix}$$

Jeżeli zdiagnozujemy tę formę kwadratową dostaniemy wartości własne dla każdego  $\vec{k}$ , czyli pasmo energetyczne.

$$(\epsilon_{\vec{k}} - \lambda)^2 - |V_{\vec{k}}|^2 = 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} = \epsilon_{\vec{k}} \pm |V_{\vec{k}}| \equiv \epsilon_{\pm}(\vec{k})$$



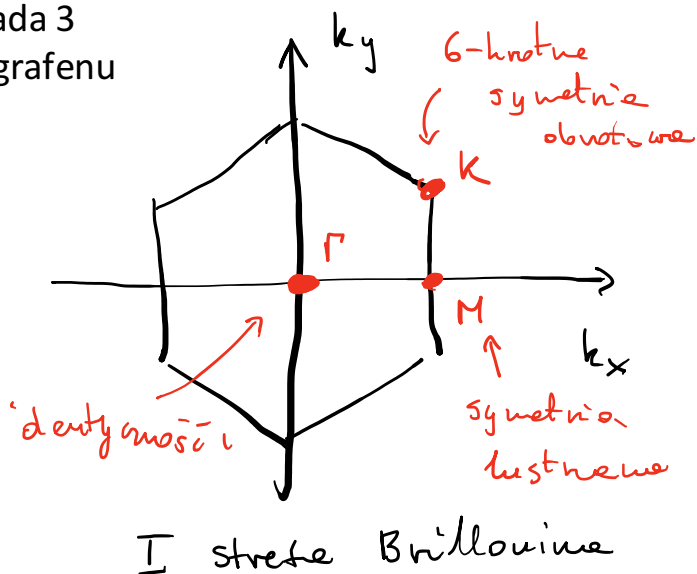
$$\Delta \varepsilon(\vec{k}) = 2|V_{\vec{k}}| \leftarrow \text{przerwa energetyczna}$$

Heksagonalna strefa Brillouina posiada 3 punkty odzwierciedlające symetrię grafenu

$$\Gamma = (0, 0, 0)$$

$$M = \frac{2\pi}{3a} (1, 0, 0)$$

$$K = \frac{2\pi}{3a} \left( 1, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0 \right)$$



K jest najciekawszym punktem w strefie Brillouina:

$$V_{\vec{k}}(K) = \left| \underbrace{\left( 1 + 2e^{-i\frac{3}{2}a \frac{2\pi}{3a}} \right)}_{-1} \underbrace{\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)}_{1/2} \right| t_{\vec{k}} = 0$$

Nie ma tu przerwy energetycznej, tj.  $\varepsilon_+(\vec{k}) = \varepsilon_-(\vec{k})$

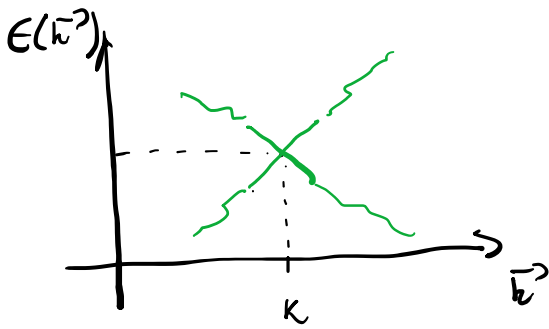
Jeżeli rozważymy małe odchylenie od K w kierunku M, wtedy

$$\begin{aligned} V_{\vec{k}} &= \left| t_{\vec{k}} \left( 1 + 2 \underbrace{e^{-i\frac{3}{2}a \frac{2\pi}{3a}}}_{-1} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a(k_y + \delta)\right) \right) \right| = \\ &= \left| \left( 1 - 2 \underbrace{\left( \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{a}ak_y\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{a}a\delta\right) - \underbrace{\sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right)}_{\frac{\sqrt{3}}{2}} \underbrace{\sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\delta\right)}_{\delta + O(\delta^2)} \right)}_{\frac{1}{2}} \right) \right| t_{\vec{k}} = \end{aligned}$$

$$\approx \frac{3}{2}a|\delta| |t_{\vec{k}}|, \text{ czyli}$$

$$\epsilon_{\pm}(\vec{k}) = \epsilon_{\vec{k}} \pm \frac{3}{2} a |\sigma_{t\vec{k}}| = \epsilon_{\vec{k}} \pm \frac{3}{2} a \frac{|\epsilon_{\vec{k}}|}{\hbar} |\rho_y|$$

↑  
kwasipart



Uzyskana relacja dyspersji jest charakterystyczna dla cząstek bezmasowych.

Ponadto hamiltonian w tym przypadku ma następującą postać

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \frac{\vec{p}}{\hbar} \Rightarrow \hat{H}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} a_k^+ & b_k^+ \\ \xi p_x - i p_y & \epsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}$   
 albo metryka  $\xi$   
 $\epsilon_{\vec{k}} \sigma_0 + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}$

Hamiltonian o takiej strukturze jest nazywany chiralnym.