

Materiały i przyrządy półprzewodnikowe

Zad. 1. Model ciasnego wiązania.

Rozważmy sieć kwadratową o stałej sieci a w 2D. Jeżeli potencjał od pojedynczego jonu zlokalizowanego w punkcie $\mathbf{R}_j$ możemy zapisać w postaci $V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ to Hamiltonian elektronu w sieci jonów przyjmuje postać

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \sum_{\mathbf{R}_j} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (1)$$

Założmy następnie, że znamy rozwiązania dla pojedynczego węzła, tzn. znamy funkcje falowe oraz energię równania

$$\hat{H}_0(\mathbf{R}_j)\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \varepsilon_n \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2)$$

A zatem Hamiltonian (1) można zapisać w postaci

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{R}_j) + \sum_{\mathbf{R}_{j'} \neq \mathbf{R}_j} V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) = \hat{H}_0(\mathbf{R}_j) + \Delta V_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Spróbujmy rozwiązać równanie (3), zakładając, że funkcja falowa

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}), \quad (4)$$

gdzie

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (5)$$

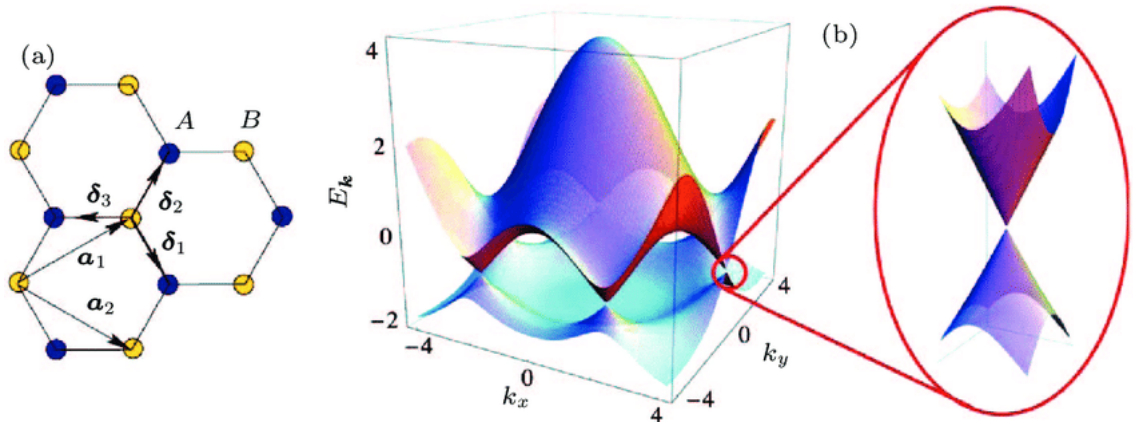
Proszę przedstawić hamiltonian (3) w postaci macierzowej w bazie funkcji $\psi_n(\mathbf{r})$.

Następnie wyznacz energię dla dwóch przypadków:

- a) zakładając $n=1$ (orbital typu s) na sieci kwadratowej z $\gamma_{11} = \langle \phi_s | \Delta V_{\mathbf{R}_j} | \phi_s \rangle = -t$ dla najbliższych sąsiadów.
- b) zakładając $n=1,2$ (orbital typu s i p_x) na sieci kwadratowej z $\gamma_{11} = \langle \phi_s | \Delta V_{\mathbf{R}_j} | \phi_s \rangle = -t_1$, $\gamma_{22} = \langle \phi_{p_x} | \Delta V_{\mathbf{R}_j} | \phi_{p_x} \rangle = -t_2$, $\gamma_{12} = \gamma_{21} = \langle \phi_s | \Delta V_{\mathbf{R}_j} | \phi_{p_x} \rangle = -t_{12}$ dla najbliższych sąsiadów.

Zad. 2. Struktura elektronowa grafenu.

Atomy węgla w warstwie grafenu tworzą sieć heksagonalną, w której każdy atom węgla sąsiaduje z trzema innymi atomami, tworząc wiązanie kowalencyjne (hybrydyzacja sp^3) - patrz rysunek poniżej. Niestety dla takiego ułożenia atomów nie da się zdefiniować komórki elementarnej sieci Bravais'go tak, aby zawierała jeden atom. Układ da się natomiast opisać siecią trójkątną z bazą zbudowaną z dwóch pozycji atomowych oznaczonych na rysunku jako A i B . Wówczas wektory komórki elementarnej określają wektory $\mathbf{a}_1$ oraz $\mathbf{a}_2$.



Rysunek 1:

Proszę:

- Znaleźć współrzędne wektorów $\mathbf{a}_1$ oraz $\mathbf{a}_2$, zakładając, że odległości pomiędzy atomami węgla równa jest a .
- Przeprowadzić obliczenia struktury elektronowej grafenu w metodzie ciastnego wiązania zakładając, że funkcje Blocha

$$\psi_{\mathbf{k}} = c_A \psi_{\mathbf{k}}^A(\mathbf{r}) + c_B \psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r}), \quad (6)$$

gdzie

$$\psi_{\mathbf{k}}^{A/B} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \phi^{A/B}(\mathbf{r} + \delta_{A/B} - \mathbf{R}_j) \quad (7)$$

P. Wójcik,