ساختار نواری گرافین

مثل زنجیر اتمی خطی c یک اوربیتال مناسب را انتخاب می‌کنیم، اینجا

P_z را انتخاب می‌کنیم. این بدین معنی است که حالت مولکولی (جامد)

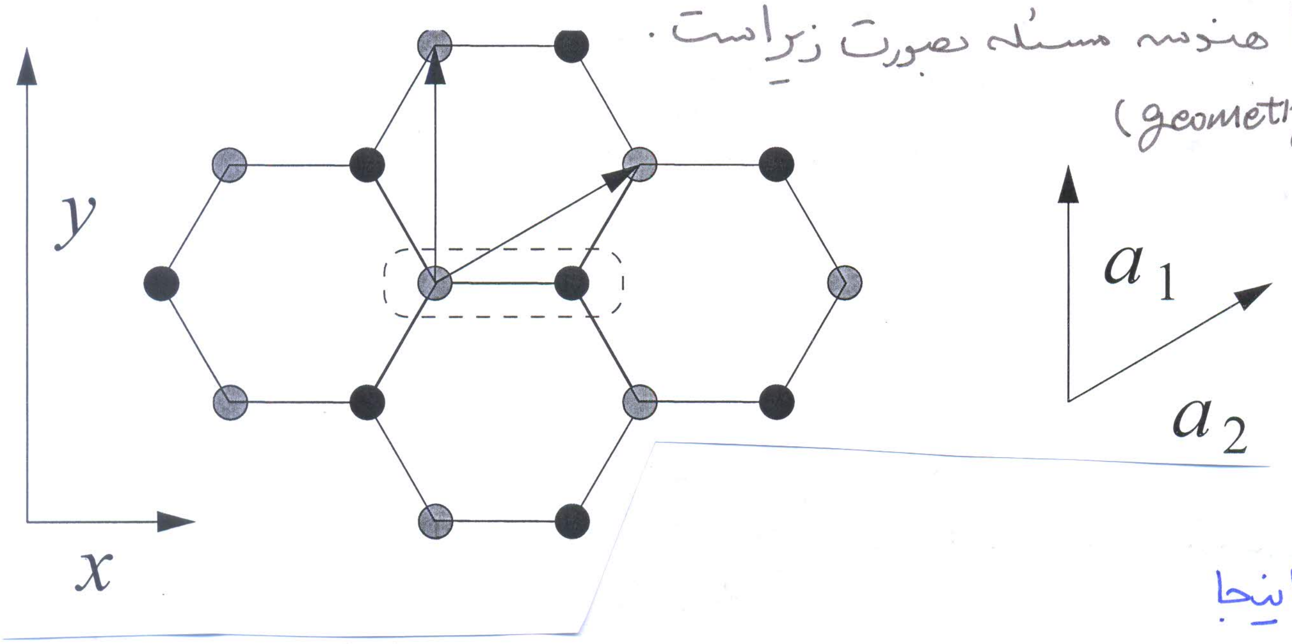
$|\psi_k\rangle$ را بدین صورت می‌توان نوشت.

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |R\rangle$$

$|R\rangle$ اوربیتال P_z در موقعیت اتمی $\vec{R}$ است.

اما هندسه مسئله بصورت زیر است.

(geometry)



در اینجا

$$\vec{a}_1 = a_0 \hat{y}$$

$$\vec{a}_2 = a_0 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y} \right)$$

همه‌ی اتم‌های بلور را می‌توان به طریق زیر به دست آورد:

۱- دو اتم را در یاخته بسیط به عنوان پایه جاید در نظر بگیریم. (پایه‌ی دو اتمی)

(سیاه و خاکستری):

b27

۲- همه‌ی اتم‌های دیگر را می‌توان با انتقال $\vec{T}$ یاخته بسیط به دست آورد:

(n,m صحیح هستند) $\vec{T}=\vec{a}_1 m+\vec{a}_2 n$ که $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ بردارهای
یاخته‌ی بسیط هستند. از آنجایی که دو اتم در یاخته داریم بهتر است از پایه‌ی
$|R_n\rangle$ استفاده کنیم:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}\sum_{\vec{R}}\sum_{n=1}^{2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} A_{n,\vec{k}}\,|\vec{R}_n\rangle$$

$|R_n\rangle$ اتم n متعلق به یاخته‌ی واقع در $\vec{R}$ را نشان می‌دهد.

($n=1$ برای اتم‌های خاکستری و $n=2$ برای اتم‌های سیاه)

- توابع پایه را متعامد در نظر می‌گیریم.

$|A_{n,k}|^2$ احتمال یافتن الکترون در حالت $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ اتم n است.

انرژی $E(\vec{k})$ با قانون بلوخ زیر به دست می‌آید:

$$E(\vec{k})A_{n',\vec{k}} = \sum_{\vec{R}}\sum_{n}^{2} e^{i\vec{k}\cdot(R-R')} A_{n,\vec{k}}\,\langle \vec{R}'n'|H|\vec{R}n\rangle$$

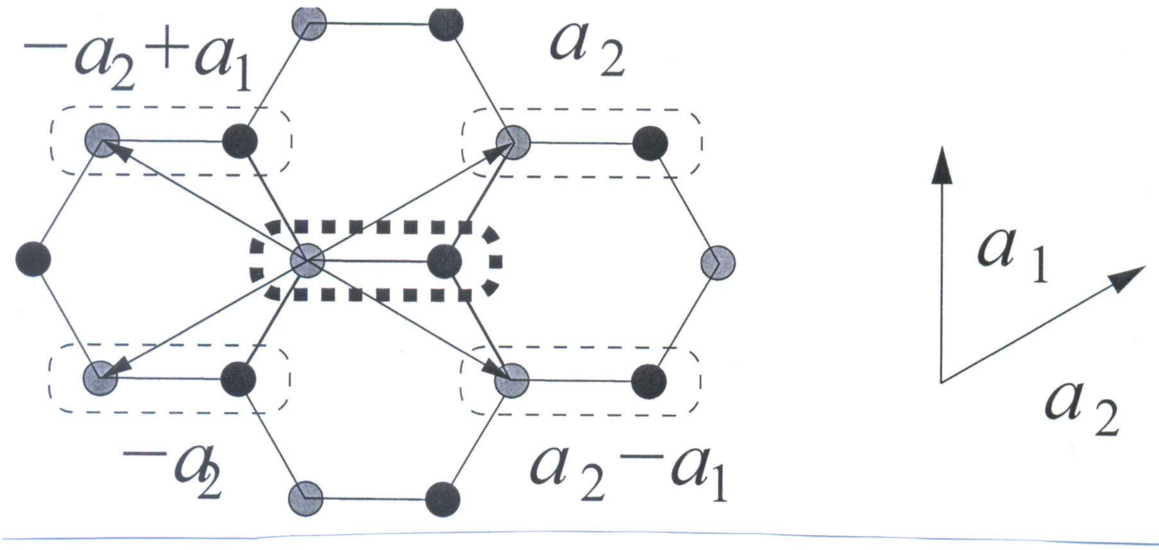
- با دقت مولفه‌های ماتریس را بدست می‌آوریم:

- فقط برهم‌کنش نزدیکترین همسایه را در نظر می‌گیریم:

- on-site energy : جفت شدگی در یاخته‌ی بسیط

$$\langle \vec{R}'n'|\mathcal{H}|\vec{R}'n\rangle = \begin{pmatrix}\epsilon_p & \gamma_{pp\pi}\\ \gamma_{pp\pi} & \epsilon_p\end{pmatrix}$$

فاکتور فاز: $e^{i\vec{k}\cdot(R'-R')}=1$



- off-diagonal terms : coupling with other cells :

جفت‌شدگی با دیگر یاخته‌ها

هر یاخته چهار یاخته نزدیکترین همسایه دارد:

1. $\vec{a}_2$ یاخته‌ی

$$\langle \vec{R}' n' | H | \vec{R}' + \vec{a}_2 \, n \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_{pp\pi} & 0 \end{pmatrix} \qquad e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}' + \vec{a}_2 - \vec{R}')} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}$$

2. $-\vec{a}_2$ یاخته

$$\langle \vec{R}' n' | H | \vec{R}' - a_2 \, n \rangle = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{pp\pi} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}' - \vec{a}_2 - \vec{R}')} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}$$

3. $\vec{a}_2 - \vec{a}_1$ یاخته‌ی

$$\langle \vec{R} n' | H | \vec{R}' + \vec{a}_2 - \vec{a}_1 n \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_{pp\pi} & 0 \end{pmatrix} \qquad e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}' + \vec{a}_2 - \vec{a}_1 - R')} = e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)}$$

4. $-\vec{a}_2 + a_1$ یاخته

$$\langle R' n' | H | \vec{R}' - \vec{a}_2 + \vec{a}_1 n \rangle = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{pp\pi} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}' - \vec{a}_2 + \vec{a}_1 - \vec{R}')} = e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)}$$

جمع همه‌ی پارامترها:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_p & \gamma_{pp\pi}\left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)}\right) \\ \gamma_{pp\pi}\left(1 + e^{i\vec{k}\cdot a_2} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)}\right) & \epsilon_p \end{pmatrix}$$

b29

$$F(\vec{k}) = 1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-ik\cdot(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)}$$

پس

$$E(\vec{k})\,\psi_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_p & \gamma_{pp\pi} F(k) \\ \gamma_{pp\pi} F^*(k) & \epsilon_p \end{pmatrix} \psi_{\vec{k}}$$

دترمینان ضرایب را صفر قرار می‌دهیم.

$$\det \begin{pmatrix} \varepsilon_p - E(\vec{k}) & \gamma_{pp\pi} F(\vec{k}) \\ \gamma_{pp\pi} F^*(\vec{k}) & \epsilon_p - E(\vec{k}) \end{pmatrix} = 0$$

$$(\varepsilon_p - E(k))^2 - \gamma_{pp\pi}^2 F(k) F^*(k) = 0$$

$$E(k) = \varepsilon_p \pm \gamma_{pp\pi} \sqrt{F(k) F^*(k)}$$

$$F(\vec{k}) = 1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-ik\cdot(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)} =$$

$$= 1 + e^{-i(k_x\hat{i} + k_y\hat{j})\cdot a_0(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{1}{2}\hat{j})} + e^{-i(k_x\hat{i} + k_y\hat{j})\cdot a_0(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} - \frac{1}{2}\hat{j})}$$

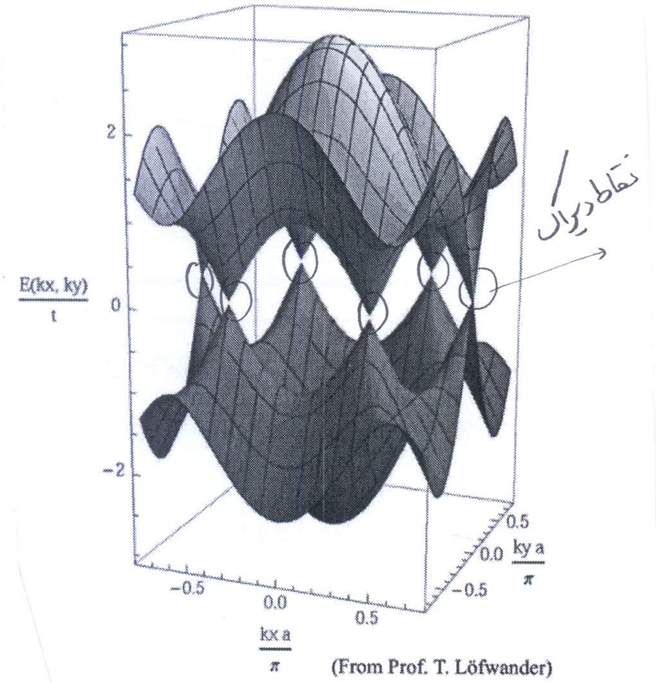
$$= 1 + e^{-ia_0 k_x \frac{\sqrt{3}}{2}} e^{-ia_0 \frac{k_y}{2}} + e^{-ia_0 k_x \frac{\sqrt{3}}{2}} e^{ia_0 \frac{k_y}{2}}$$

$$= 1 + e^{-ia_0 k_x \frac{\sqrt{3}}{2}} \left(e^{-ia_0 \frac{k_y}{2}} + e^{ia_0 \frac{k_y}{2}} \right)$$

$$F(\vec{k}) = 1 + 2 e^{-ia_0 k_x \frac{\sqrt{3}}{2}} \cos\left(\frac{k_y}{2} a_0\right)$$

$$E(k) = \varepsilon_p \pm \gamma_{pp\pi} \sqrt{\left(1 + 2e^{-ia_0 k_x \frac{\sqrt{3}}{2}} \cos\left(\frac{k_y a_0}{2}\right)\right)\left(1 + 2e^{ia_0 k_x \frac{\sqrt{3}}{2}} \cos\left(\frac{k_y a_0}{2}\right)\right)}$$

$$= \epsilon_p \pm \gamma_{pp\pi} \sqrt{1 + 4\cos^2\left(\frac{k_y a_0}{2}\right) + 4\cos\left(\frac{k_y a_0}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x a_0\right)}$$

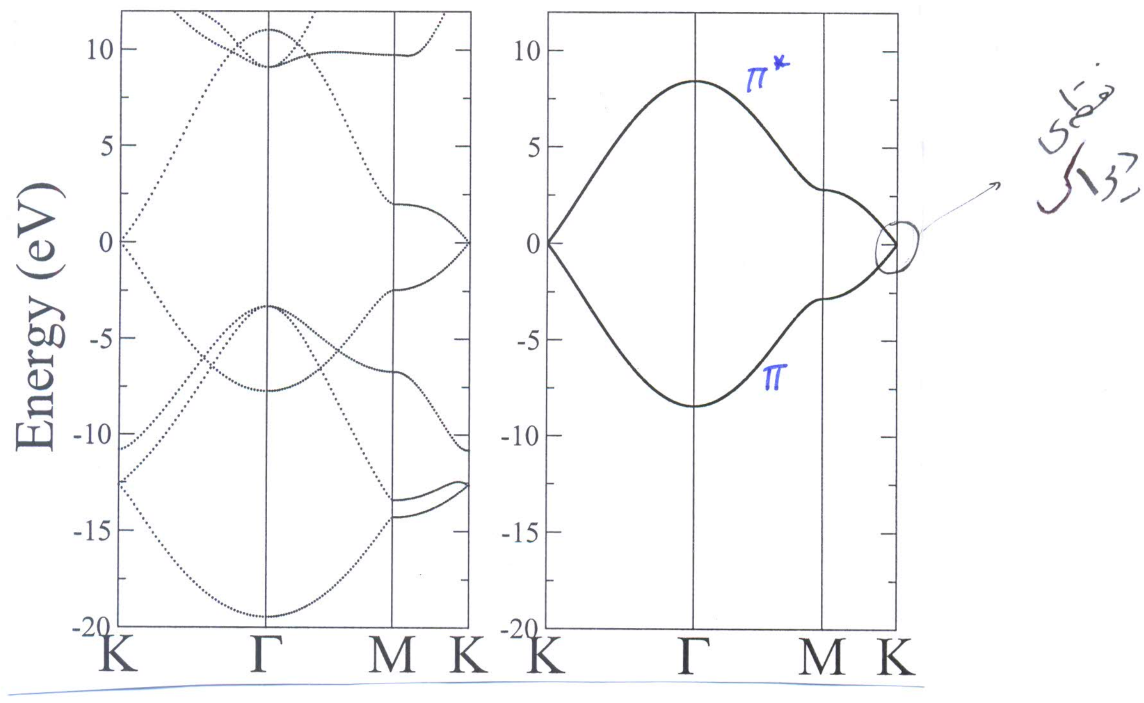


E-k dispersion relation in the first Brillouin zone

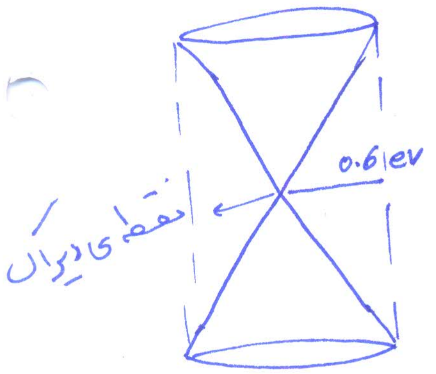
نوار π با $E(\vec{k}) < \epsilon_p$ ← قسمت bonding نوار است ← نوار π

نوار π با $E(\vec{k}) > \epsilon_p$ ← قسمت antibonding نوار است ← نوار π^*

دو اشکال ← نوار π نسبت به $E=\epsilon_p$ متقارن هستند.
← یک نوار یا هیچ نوار وجود ندارند.



b31



$$E(\vec{k})^{\pm}_{linear} = \pm \hbar |\vec{k}| v_F$$

$$v_F = \frac{3a|t|}{2\hbar} = 10^{6} \frac{m}{s}$$

۳۰۰ برابر کمتر از سرعت نور