

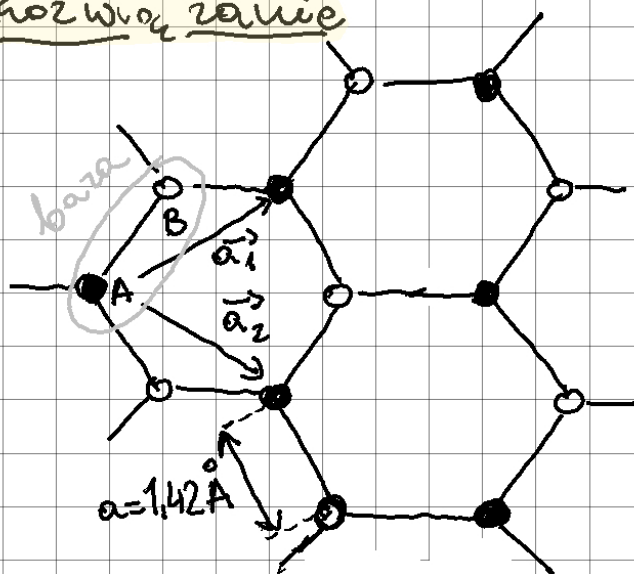
MECHANIKA KWANTOWA II B Ćw. #7 20.11.2018

Dokończenie zadania z poprzednich ćwiczeń.

① Grafen

Rozwiązać model ciasnego wiązania w przypadku grafenu. Znaleźć relację dyspersji oraz sprawdzić czy dla tego materiału występuje przerwa energetyczna. Macierz hamiltonianu rozwinąć w pobliżu punktu K w strefie Brillouina. Co możemy nam uzyskać wynik?

Rozwiązanie



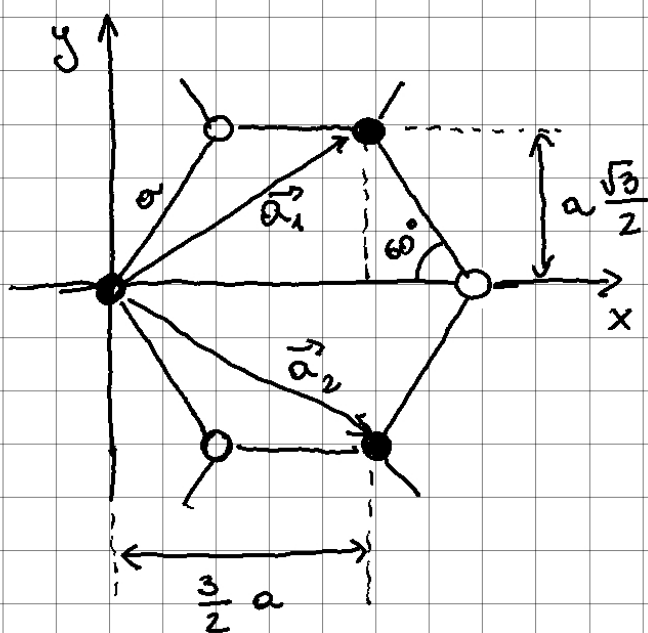
Grafen jest dwuwymiarowym kryształem zbudowanym z atomów węgla ustawionych w strukturalne płaszczyzny.

miodu. Grafen posiada dwa
nierównoważne atomy tworzące bazę.

$$(\text{struktura}) = \text{sieć} + \text{ baza}$$

Wektor translacji $\vec{R}$ dla grafenu
można przedstawić w postaci wektorów
pymitywnych:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$



$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}a \\ \frac{\sqrt{3}}{2}a \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a}_2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}a \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}a \\ 0 \end{pmatrix}$$

Konstruujemy wektory pymitywne
sieci odwrotnej:

$$\vec{b}_i = 2\pi \epsilon_{ijk} \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\Omega_0},$$

$\Omega_0 = |\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)|$ - objętość komórki elementarnej
 obrotowy wektor jednostkowy wzdłuż
 osi z: $\vec{a}_3 = (0, 0, 1)$

$$\Omega_0 = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega_0} = -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega_0} = -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Chcemy skonstruować hamiltonian

w postaci Π kwantyzacji w tym

celu posłużymy się operatorem pola:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \underbrace{\hat{\psi}^A(\vec{r}) + \hat{\psi}^B(\vec{r})}_{\text{operatory pola dla podsięci}},$$

czyli stosujemy przybliżenie cięsnego

wiązania, tj. możliwe jest przekrywanie

się orbitali zlokalizowanych tylko dla

najbliższych sąsiadów, czyli

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \hat{\psi}^A(\vec{r}) + \hat{\psi}^B(\vec{r}) = \sum_{j \in A} \phi_j^A(\vec{r}) a_j + \sum_{j \in B} \phi_j^B(\vec{r}) b_j$$

$\nwarrow$ $\nearrow$
 zlokalizowane
 funkcje falowe

Zatem nasz hamiltonian możemy zapisać w II kwantyzacji w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{II}} &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{H} \hat{\psi}(\vec{r}) = \int d^3r \hat{\psi}^{A\dagger} \hat{H} \hat{\psi}^A + \int d^3r \hat{\psi}^{B\dagger} \hat{H} \hat{\psi}^B + \\ &+ \int d^3r \hat{\psi}^{A\dagger} \hat{H} \hat{\psi}^B + \int d^3r \hat{\psi}^{B\dagger} \hat{H} \hat{\psi}^A = \\ &= \hat{H}_{AA} + \hat{H}_{BB} + \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BA} \end{aligned}$$

wykorzystamy teraz funkcje Wanniera jako wygodny wybór zlokalizowanej bazy funkcji falowych:

$$\int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$$

$\uparrow$ funkcje Wanniera

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

N - liczba węzłów

$\vec{R}_i$ - położenie i -tego węzła

$\psi_{\vec{w}}(\vec{r})$ - funkcja faliowa Blocha

Hamiltonian w reprezentacji Π kwantyzacji:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\Pi} &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{H} \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{i,j \in A} \int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r}) a_i^\dagger a_j + \\ &+ \sum_{i,j \in B} \int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r}) b_i^\dagger b_j + \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} \int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r}) a_i^\dagger b_j + \\ &+ \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} \int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H} \phi_j(\vec{r}) b_i^\dagger a_j \approx \\ &\quad \uparrow \text{f. Wannierowa} \\ &\quad \text{sekcje zlokalizowane}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\approx & \sum_{i \in A} \varepsilon_A a_i^\dagger a_i + \sum_{j \in B} \varepsilon_B b_j^\dagger b_j + \sum_{\substack{i \in B \\ <ij>}} (t_{ij} a_i^\dagger b_j + t_{ji} b_i^\dagger a_j) \\ & \quad \uparrow \\ & \quad \text{najbliżsi} \\ & \quad \text{seksiedni}\end{aligned}$$

Przechodząc do przestrzeni odwrotnej

wykorzystując funkcje Blocha:

$$\begin{cases} \hat{\psi}_A(\vec{r}) = \sum_{i \in A} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{w}} e^{-i\vec{w} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{w}}(\vec{r}) a_{\vec{w}} \\ \hat{\psi}_B(\vec{r}) = \sum_{i \in B} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{w}} e^{-i\vec{w} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{w}}(\vec{r}) b_{\vec{w}} \end{cases}$$

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

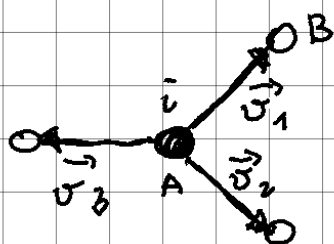
$$= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \int d^3r \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}$$

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

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

$$= \sum_{i \in A} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_i^A} e^{-i(\vec{R}_j^B - \vec{R}_i^A) \cdot \vec{k}'} \langle \psi_{\vec{k}} | \hat{H} | \psi_{\vec{k}'} \rangle a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}'} =$$

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



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

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

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

czyli

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

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

Analogicznie dla $\hat{H}_{BA}$.

Hamiltonian możemy zapisać w postaci maciernej:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^{\dagger}, b_{\vec{k}}^{\dagger}) \begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}} & V_{\vec{k}} \\ V_{\vec{k}}^* & \varepsilon_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix},$$

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

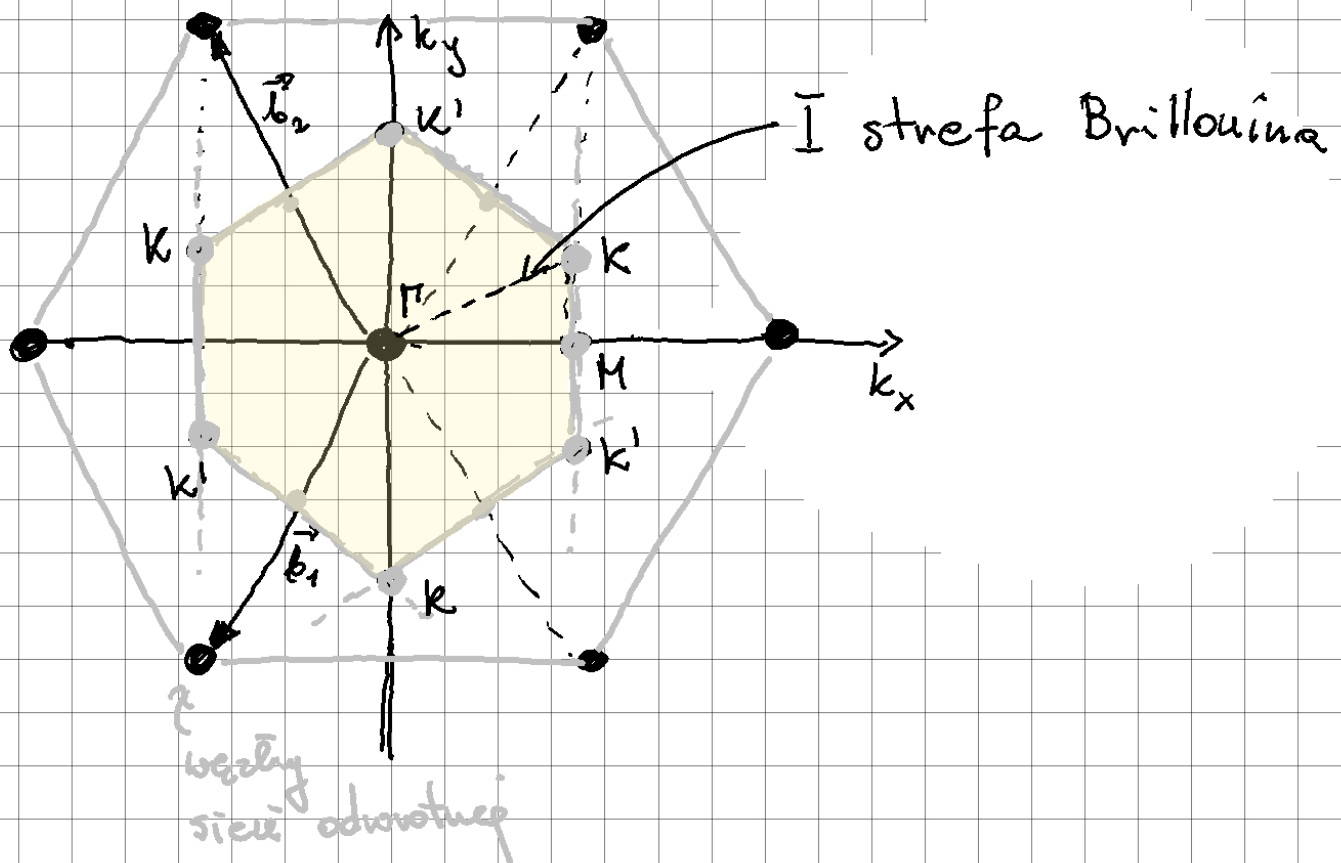
Jeżeli zdiagnozujemy tę formę kwadratową dostaniemy wartości własne dla każdego $\vec{k} \in 1\text{BZ}$, czyli pasma energetyczne.

$$(\varepsilon_{\vec{k}} - \lambda)^2 - |V_{\vec{k}}|^2 = 0 \Rightarrow \varepsilon_{\vec{k}}^2 - 2\lambda \varepsilon_{\vec{k}} - \lambda^2 - |V_{\vec{k}}|^2 = 0$$

$$\Rightarrow \varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \varepsilon_{\vec{k}} \pm |V_{\vec{k}}|$$

Przerwa energetyczna:

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



Heksagonalna strefa Brillouina

posiada trzy typy punktów o podwyższonej symetrii, które odzwierciedlają symetrię grafenu:

- punkt Γ : $\vec{k}_{\Gamma} = (0,0,0)$ - tożsamość
(symetria odbicia względem środka symetrii)
- punkt M : $\vec{k}_M = \frac{2\pi}{3a}(1,0,0)$ - symetria zwierciadłana

• punkt K: $\vec{k}_K = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0 \right)$

Punkt K zwany także punktem Diraca jest najcieńszym w strefie Brillouina, bo:

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

co w punkcie K zanika sie pierwsza energetyczna, tj. $\varepsilon_+(\vec{k}_K) = \varepsilon_-(\vec{k}_K)$,

co więcej

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \varepsilon_{\pm}(\vec{k}_K + \vec{q}) = \pm |t_{\vec{K}}| \cdot$$

$$\bullet \sqrt{\left(3 + 2 \cos \left[\sqrt{3} \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} + q_x \right) a \right] + 4 \cos \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} a \right) \right] \cos \left[\frac{3}{2} q_y a \right] \right)} =$$

$$\approx \pm \frac{3}{2} |t_{\vec{K}}| a \sqrt{q_x^2 + q_y^2} + \mathcal{O}(q^2) = \pm \frac{3}{2} |t_{\vec{K}}| a q + \mathcal{O}(q^2)$$

↑
dla małych $\vec{q}$

zatem w pobliżu punktu K relacja dyspersji ma kształt stożka (jest to tzw. stożek Diraca).

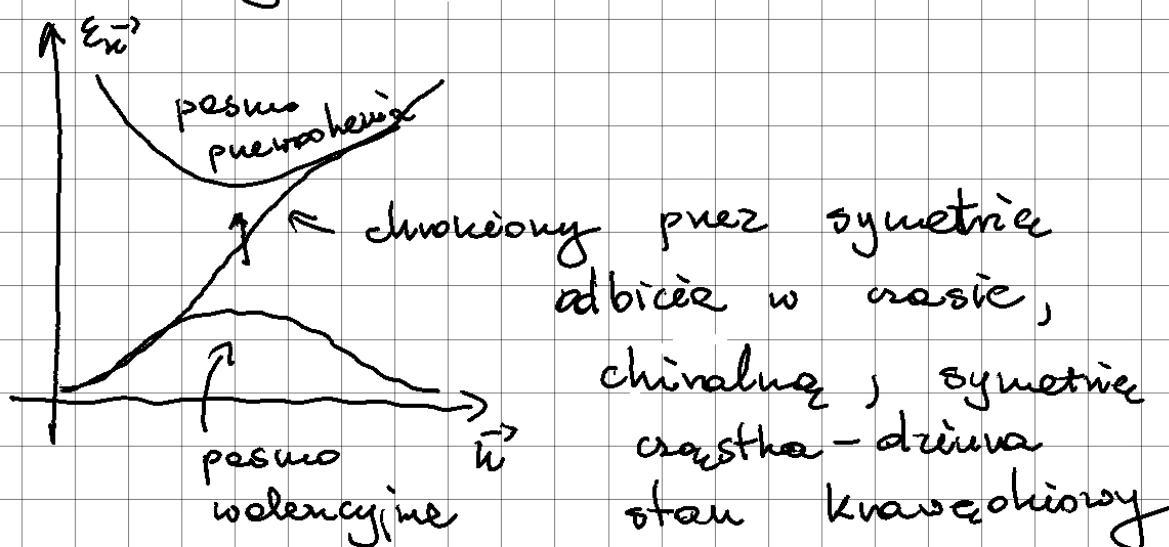
Zapisując macierz hamiltonianu w pobliżu punktu K dostajemy:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\vec{k}_K + \vec{q}) &= \frac{3}{2} |t_{\vec{K}}| a \begin{pmatrix} 0 & \zeta q_x - i q_y \\ \zeta q_x + i q_y & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(q^2) = \\ &\quad \begin{matrix} \uparrow \\ \varepsilon_{\vec{K}} = 0 \end{matrix} \quad \left\{ \begin{array}{l} \zeta = +1 \text{ dla punktów } K \\ \zeta = -1 \text{ dla punktów } K' \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{izospin} \\ \text{dolinny} \end{array} \right\} \\ &= \zeta \frac{3}{2} |t_{\vec{K}}| a (q_x \sigma_x + q_y \sigma_y) = \zeta \hbar v_F \vec{q} \cdot \vec{\sigma}, \\ &\quad v_F = \frac{3}{2} \frac{|t_{\vec{K}}| a}{\hbar} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ \text{prędkość} \\ \text{Fermiego} \end{matrix} \end{aligned}$$

czyli elektrony w grafenie spełniają równanie Weyla, które opisuje bezmasowe „relatywistyczne” fermiony Weyla o spinie $1/2$. Hamiltonian Weyla jest przykładem hamiltonianu chiralnego:

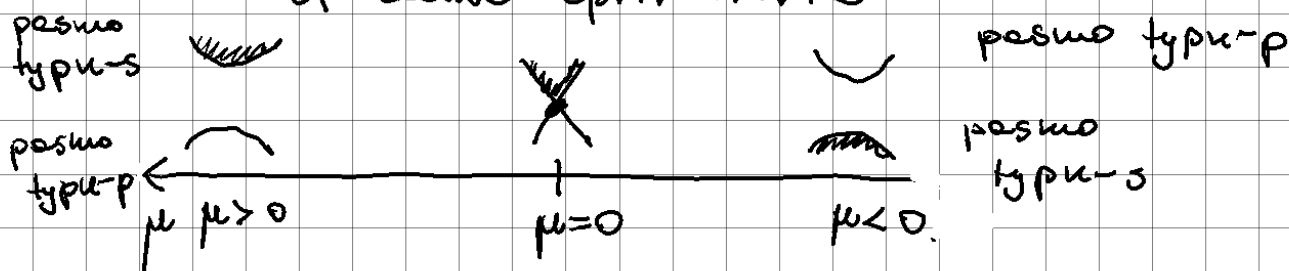
$$\hat{H} = \hbar v_F \vec{p} \cdot \vec{\sigma} = \text{sgn}(v_F) |E| \underbrace{\frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{p}| |\vec{\sigma}|}}_{\hat{\chi} \text{ - operator chiralności}}$$

Hamiltoniany podobnego typu
 pełnią istotną rolę w teorii
 izolatorów topologicznych, które w
 swojej objętości zachowują się jak
 izolatory, ale na swojej powierzchni mają
 chronione przez symetrię stany metaliczne.



Model uproszczony: (2 pasma)

$$\hat{H}_{2b} = \underbrace{\hbar v_F k_x \sigma_x + \hbar v_F k_y \sigma_y}_{\text{sprężenie spin-orbite}} + \mu \sigma_z$$



W układach taluści występuje całkowitoliczbowy kwantowy efekt

$$\text{Halla : } \sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} C,$$

↑
element σ_{xy} tensora
przewodnictwa

gdzie $C = 0, 1, 2, \dots$ jest niezmiennikiem topologicznym, tzw. liczbą Cherna.

Dla zainteresowanych więcej na ten temat będzie można dowiedzieć się rozwiązując zadanie dodatkowe z serii 3 zadań domowych.