ჰექსაგონალური მესერის ენერგეტიკული სპექტრები

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ლაშა ფანცხავა , თათია შარია , ელენე საჯაია

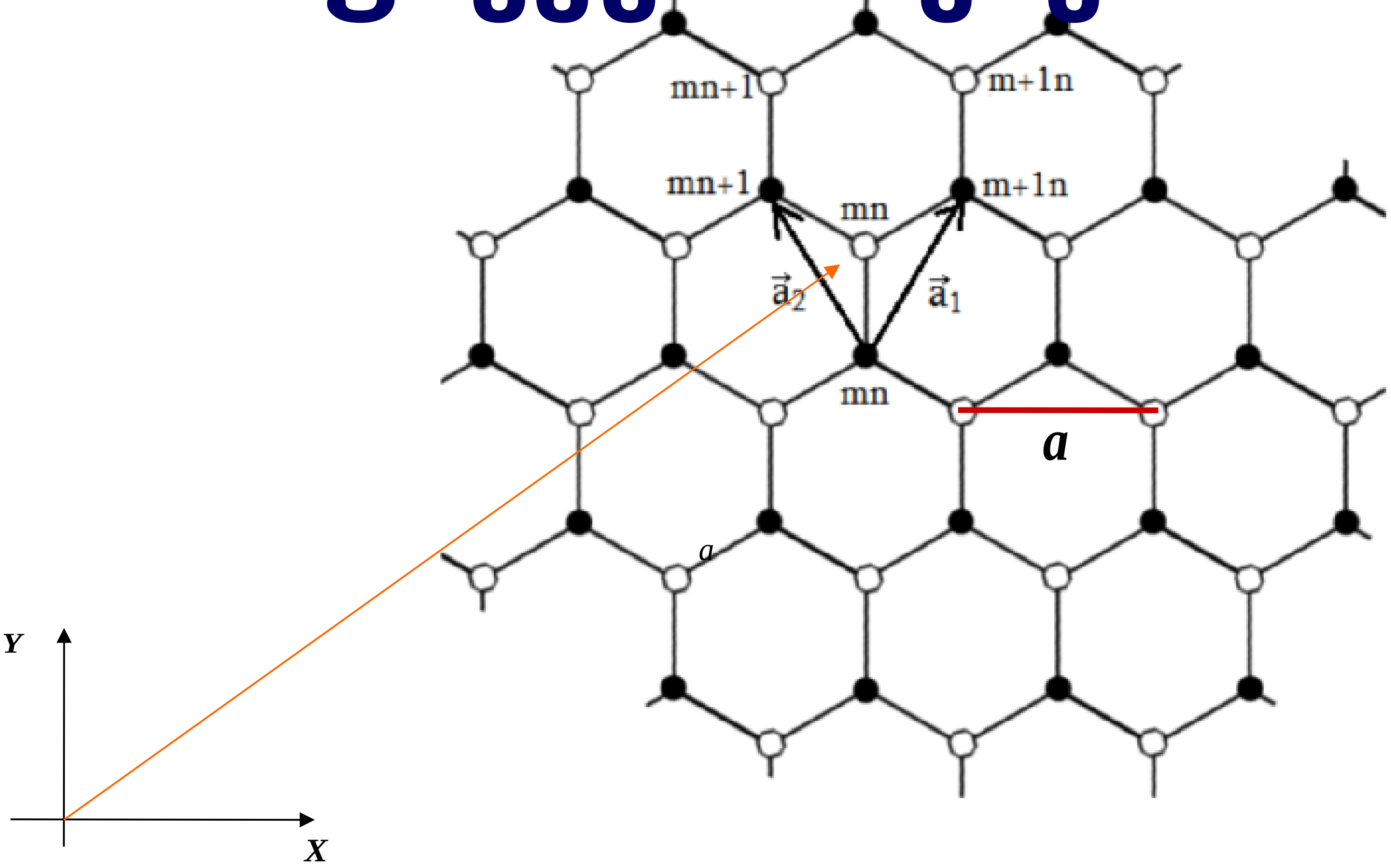
სიღნაღი

2016

ამოცანის დასმა

- ჰექსაგონალური მესერი
  - მჭიდრო ბმის მოდელი
    - ჰუბარდის ჰამილტონიანი
    - სისტემის ენერგიის დათვლა

ფიჭური მესერი



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

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

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

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

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

Brillouin zone

$$C_{m,n} = C(\vec{r}_{m,n}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{k}\vec{r}_{m,n}} \tilde{C}(\vec{k})\, d\vec{k} = \int_{BZ} e^{i\vec{k}\vec{r}_{m,n}} C(\vec{k})\, d\vec{k}$$

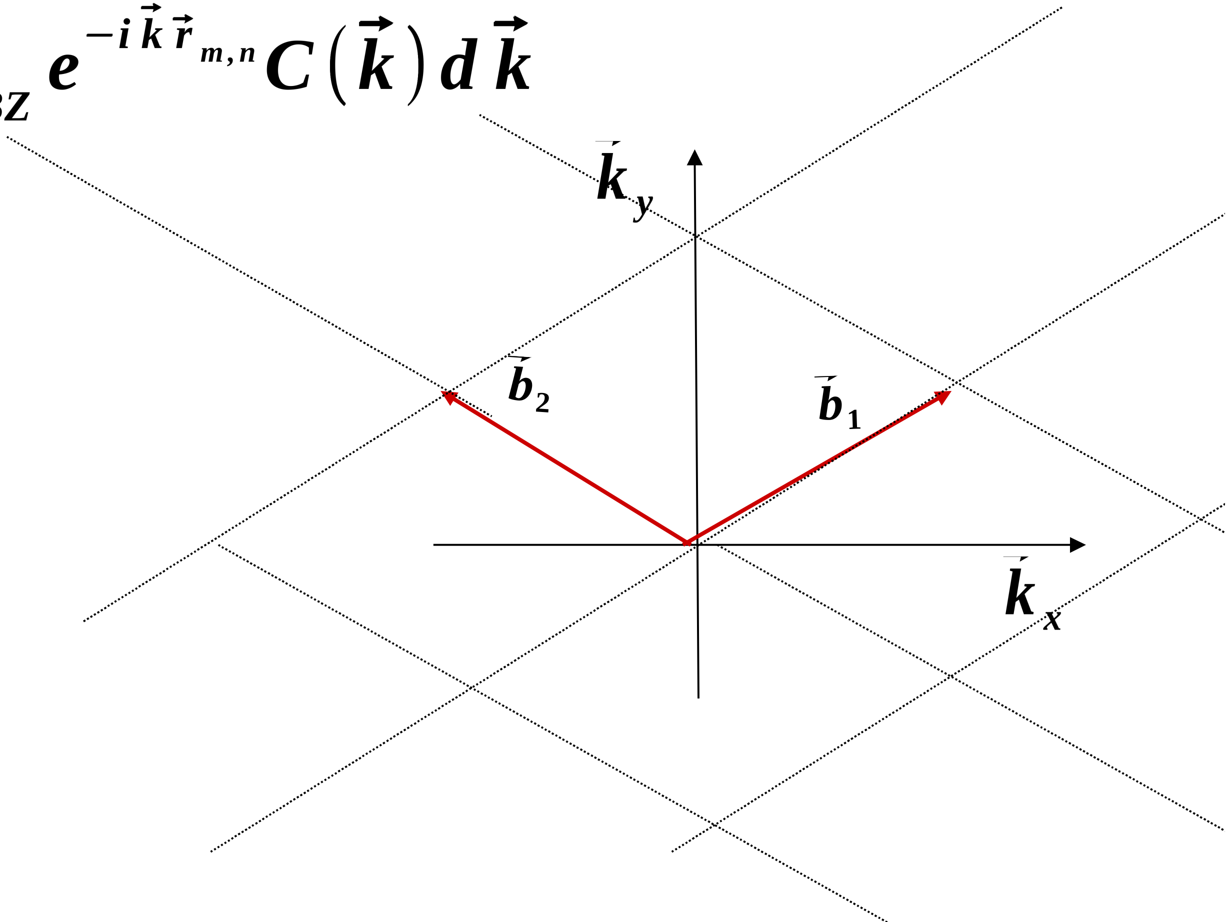
$$C(\vec{k}) = \sum e^{-i\vec{k}\vec{r}_{m,n}} C_{m,n} \equiv f(\vec{k})$$

$$C^{\dagger}_{m,n} = \int_{BZ} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{m,n}} C(\vec{k})\, d\vec{k}$$

$$\vec{a}_i * \vec{b}_j = 2\pi\delta_{i,j}$$

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

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



მჭიდრო ბმის მოდელი

- ელექტრონი არის განთავსებული საკუთარი ატომის სტანდარტულ ორბიტალზე

- ატომებთან გვაქვს მჭიდრო ბმა

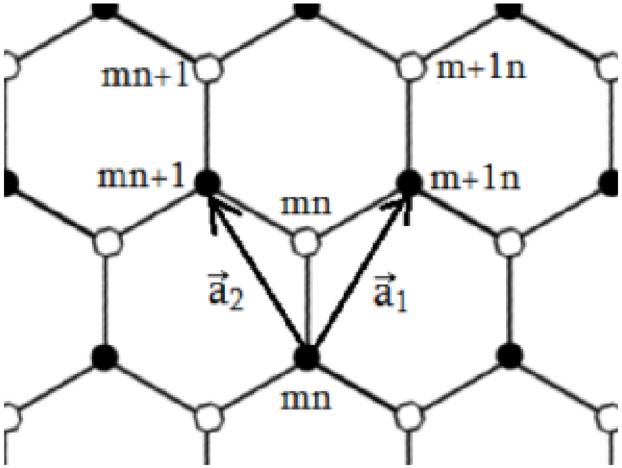
- გარეშე ატომების ურთიერთქმედება მცირეა

ჰუბარდის ჰამილტონიანი

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} \left(c^{\dagger}{}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + c^{\dagger}{}_{j,\sigma} c_{i,\sigma} \right) + U \sum_{i=1}^{N} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

კინეტიკური ენერგია

ურთიერთქმედების ენერგია



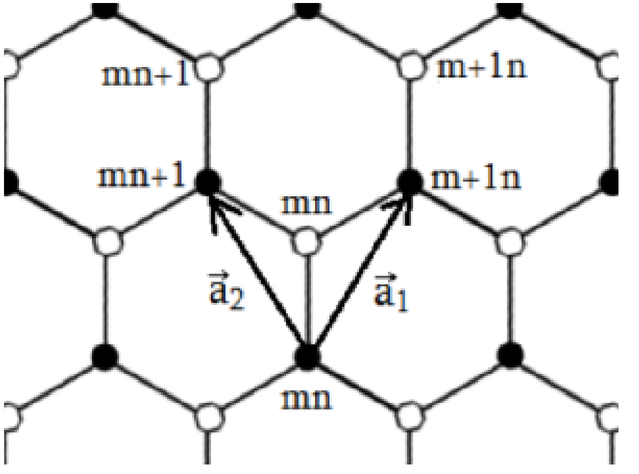
მჭიდრო-ბმის მოდელის თანახმად

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

გაჩენა გაქრობის ოპერატორების გამოყენება

m,n ინდექსის მქონე თეთრ წერტილში ელექტრონის გაქრობის ოპერატორს ექნება შემდეგი სახე

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



ხოლო m,n ინდექსის მქონე შავი წერტილში ელექტრონის გაქრობის ოპერატორს

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

ჰამილტონიანი მიიღებს შემდეგ სახეს

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

$$+ [1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\vec{a}_2}] f^{\dagger}{}_{\circ}(\vec{k}) f_{\bullet}(\vec{k}\,')\, d\vec{k}$$

მატრიცული ჩაწერა

$$\Psi^{\dagger}(\vec{k}) = \left((f)_{\circ}(\vec{k}) \;,\; (f)_{\bullet}(\vec{k})\right)$$

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

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

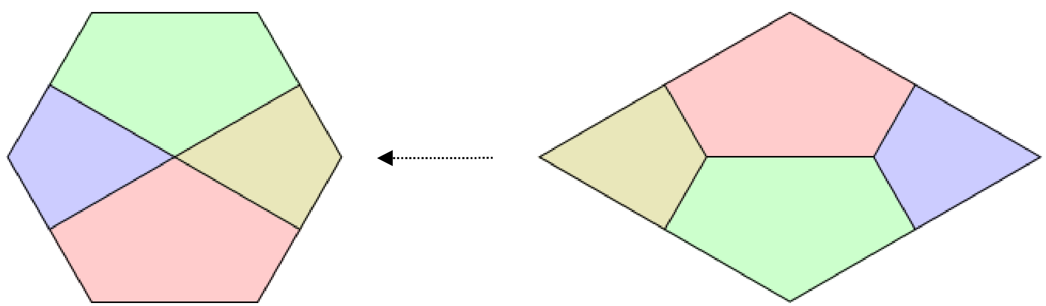
$$H = \int \Psi^{\dagger}(\vec{k})\,\bar{H}\,\Psi(\vec{k})\,d\vec{k}$$

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

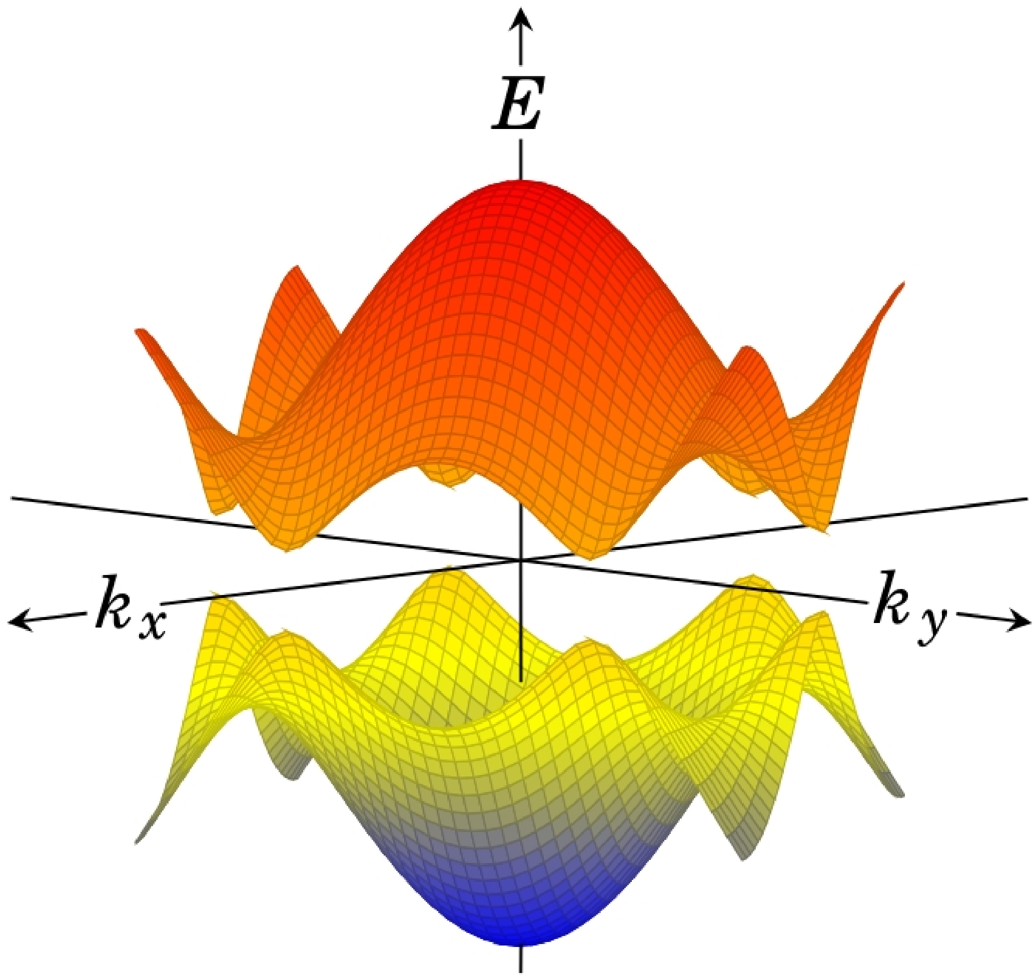
საკუთარი რიცხვების დათვლა

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

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



ენერგია



სამომავლო გეგმა

ამოცანაში შემოდის მაგნიტური ველი

გმადლობთ ყურადღებისთვის