



ჰექსაგონალური მესერის ენერგეტიკული სპექტრები

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ლაშა ფანცხავა , თათია შარია , ელენე საჯაია

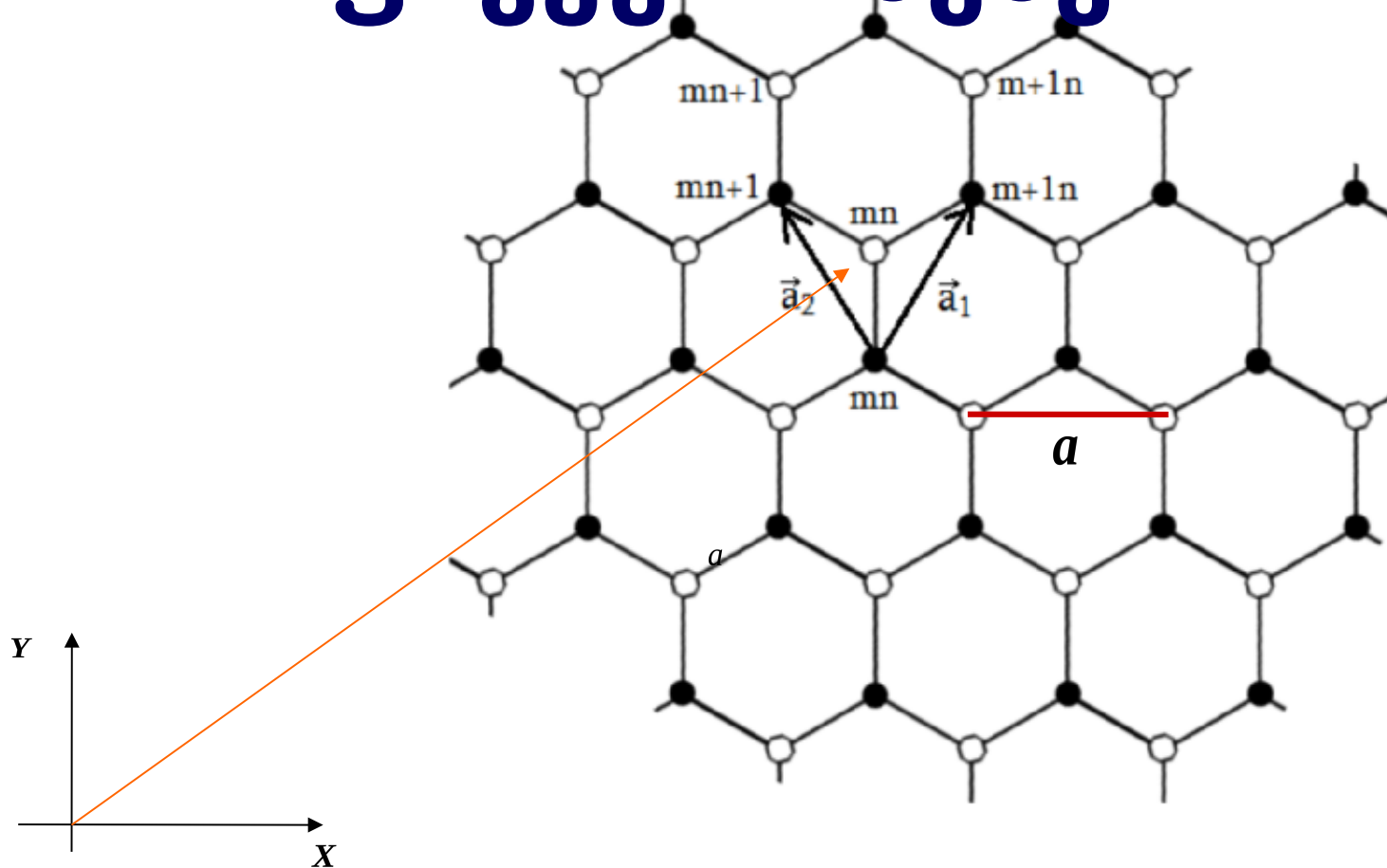
სიღნაღი

2016

ამოცანის დასმა

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

ფიჭვური 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

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

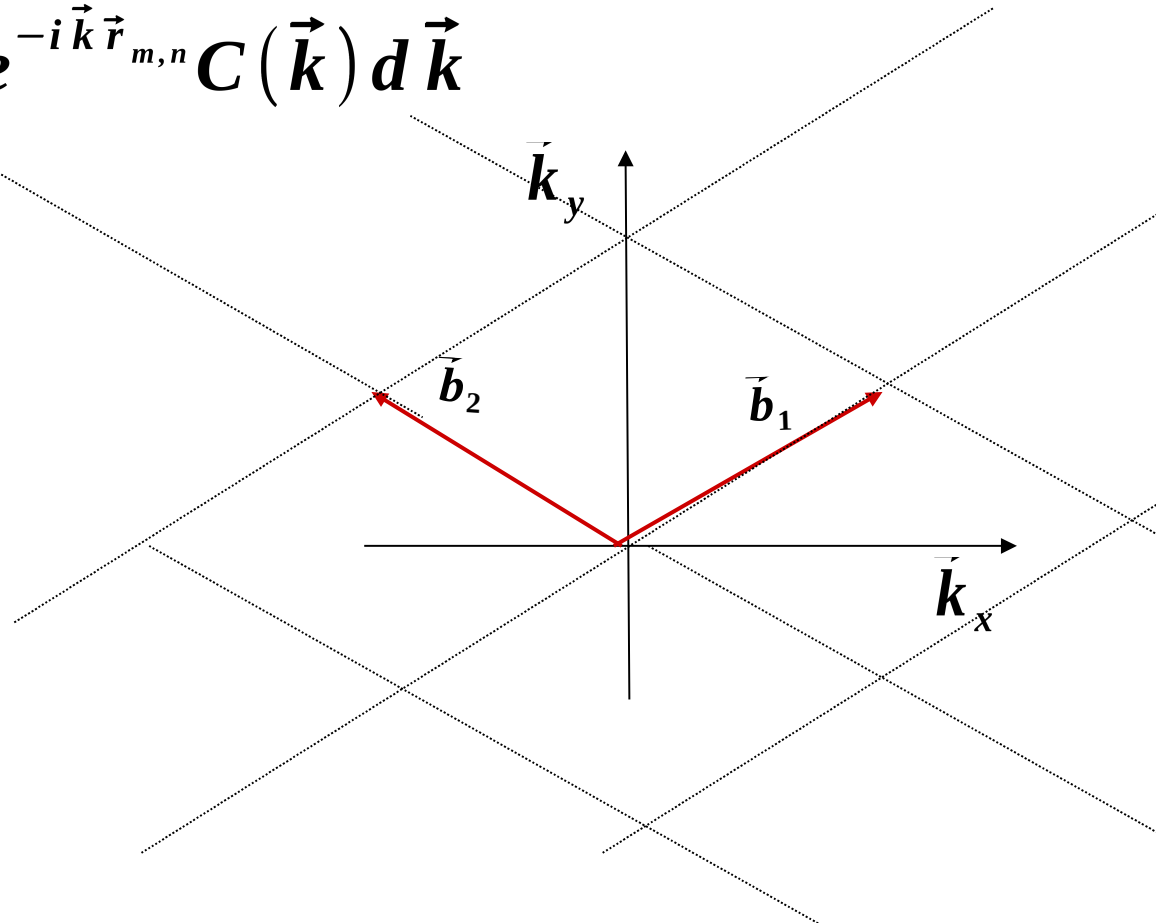
$$C(\vec{k}) = \sum e^{-i\vec{k}\vec{r}_{m,n}} C_{m,n} \equiv f(\vec{k})$$

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

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

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

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

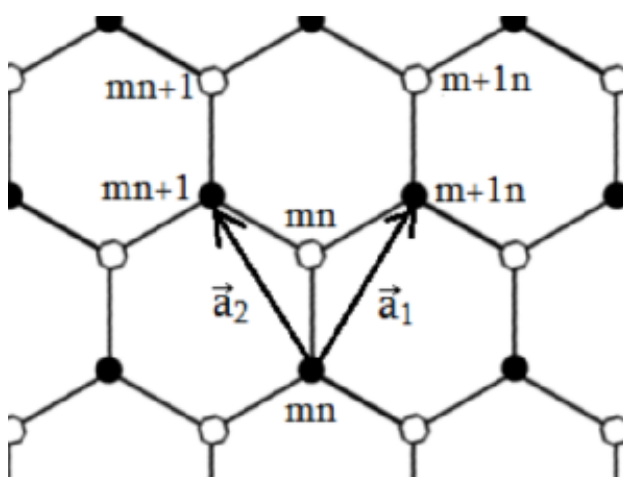


მჭიდრო ბმის მოდელი

- ელექტრონი არის განთავსებული საკუთარი ატომის სტანდარტულ ორბიტალზე
- ატომებთან გვაქვს მჭიდრო ბმა
- გარეშე ატომების ურთიერთქმედება მცირეა

ჰუბარდის ჰამილტონიანი

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



კინეტიკური ენერგია

ურთიერთქმედების ენერგია

მჭიდრო-ბმის მოდელის თანახმად

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

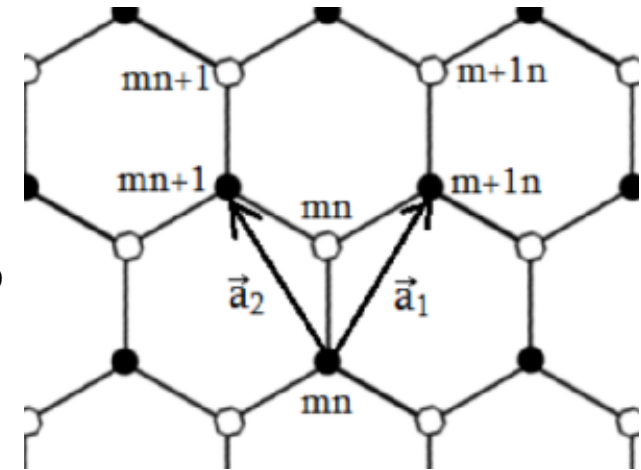
გაჩენა გაქრობის ოპერატორების გამოყენება

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

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

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

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

მატრიცული ჩანერა

$$\Psi^\dagger(\vec{k}) = ((f)_o(\vec{k}) , (f)_\bullet(\vec{k}))$$

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

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

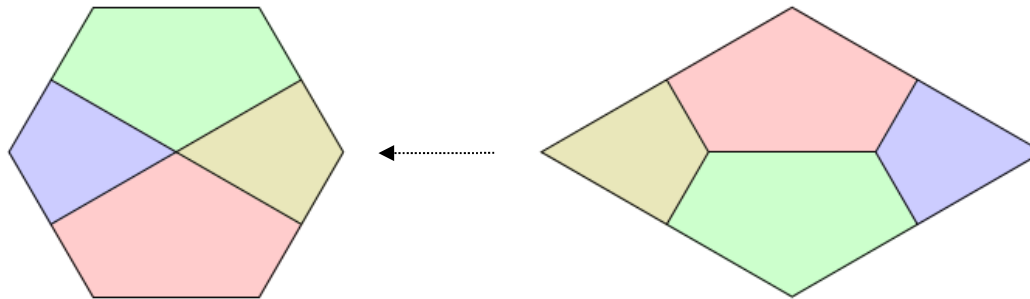
$$H = \int \Psi^\dagger(\vec{k}) \bar{H} \Psi(\vec{k}) d\vec{k}$$

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

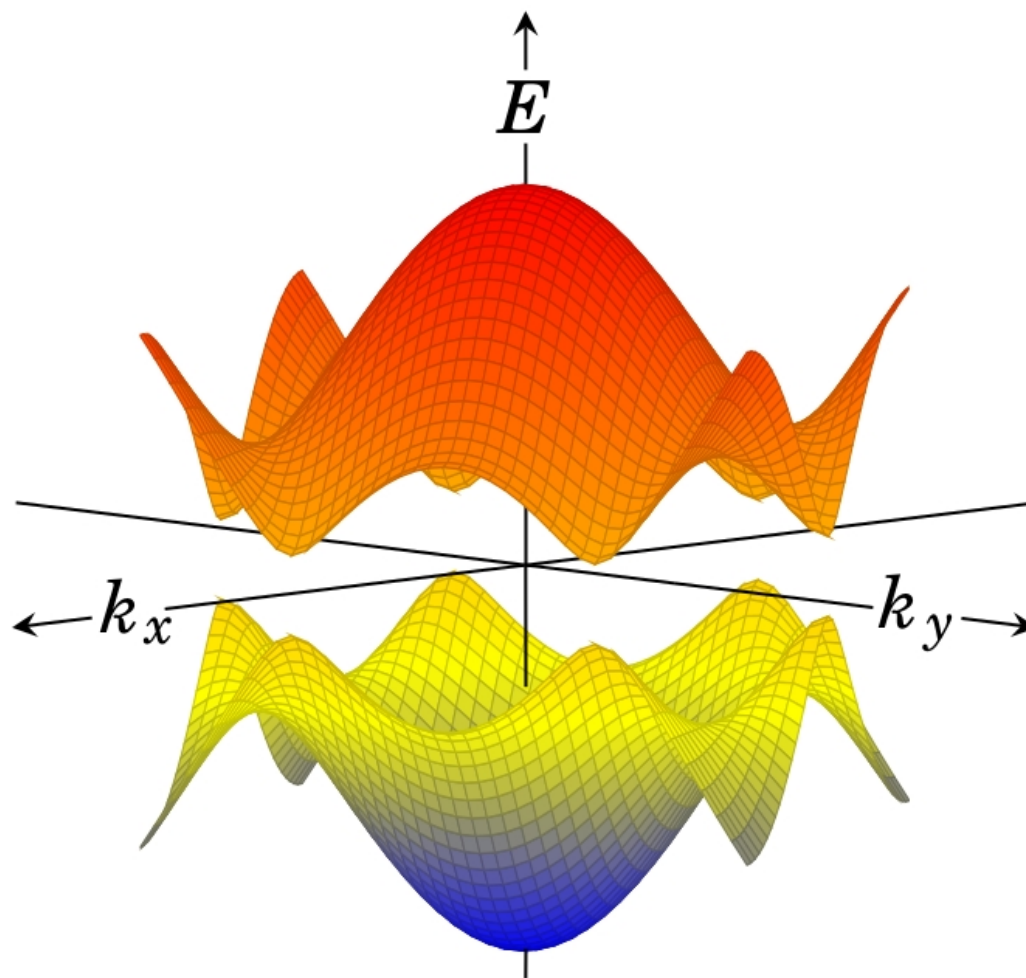
საკუთარი რიცხვების დათვლა

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

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



ენერჯია



სამომავლო გეგმა

ამოცანაში შემოდის მაგნიტური ველი

გმადლობთ ყურადღებისთვის