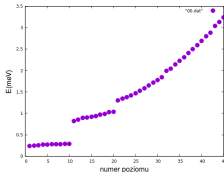
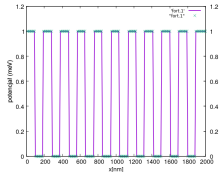


# Stany stacjonarne w potencjale periodycznym

20 października 2020

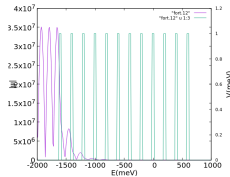
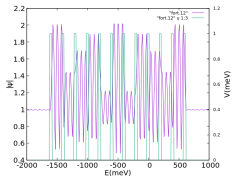
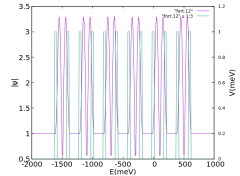
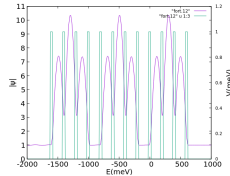
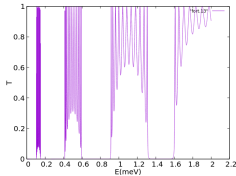
# zamknięty układ wielu barier/studni



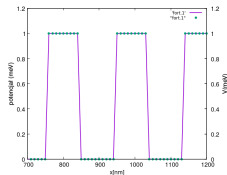
- poprzednio badaliśmy sztuczny kryształ składający się ze skończonej liczby studni w studni nieskończonej (tyle stanów w pasmie ile studni)

# otwarty układ wielu barier/studni

- badaliśmy również skończony układ wielu studni i transport przez niego w zależności od energii

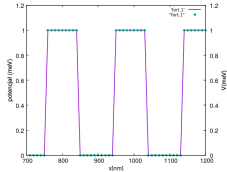


# problem o symetrii translacyjnej



- weźmy nieskończony układ o symetrii translacyjnej
- jeden okres "kryształu"  $R = 180$  nm czyli  $18dx$ , z  $dx = 10$  nm
- 9 oczek w barierze, 9 oczek w studni

# twierdzenie Blocha



- jeden okres "kryształu"  $R = 180$  nm czyli  $18dx$ , z  $dx = 10$  nm

- twierdzenie Blocha: funkcje własne elektronu w potencjale periodycznym o okresie  $R$  można przedstawić w postaci:

- $$\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x),$$

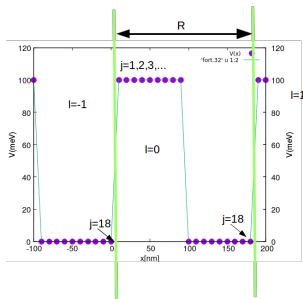
- gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$

- $\Psi_k$  - fala Blocha,  $u$  - funkcja okresowa,  $k$  - krystaliczny wektor falowy
- $|\Psi_k|^2$  - gęstość prawdopodobieństwa dla funkcji falowej Blocha ma periodyczność potencjału krystalicznego
- stany z  $k$  oraz  $k + G$  są równoważne o ile  $G$  to wektor sieci odwrotnej

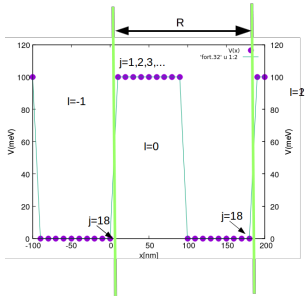
# problem o symetrii translacyjnej



- jeden okres "kryształu"  $R = 180$  nm czyli  $18dx$ , z  $dx = 10$  nm
- 9 oczek w barierze, 9 oczek w studni
- twierdzenie Blocha  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- poszukamy rozwiązania w formie:  $\Psi_k^{l,j} = \exp(iklR)u_k^j$
- $l$ - numer komórki elementarnej,  $j$  numer atomu w komórce



# problem o symetrii translacyjnej



- $\Psi_k^{l,j} = \exp(iklR)u_k^j$
- dla komórki  $l = 0$   $\Psi_k^{l,j} = u_k^j$
- poza węzłami  $j = 1$  oraz  $j = 18$ :  
 $H\Psi_k^{l=0,j} = H u_k^j$

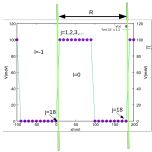
- $H u_k^j = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2} (u_k^{j-1} + u_k^{j+1} - 2u_k^j) + V(j)u_k^j$  - forma macierzowa jak wyżej dla sztywnych warunków brzegowych, dla pełnej funkcji falowej  $\Psi$

- dla węzła  $j = 1$  sąsiad z lewej strony  $\Psi_k^{l=0,j=0} = \Psi_k^{l=-1,j=18} = \exp(-ikR)u_k^{j=18}$   
 $H\Psi_k^{l=0,j=1} = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2} (u_k^{18} \exp(-ikR) + u_k^2 - 2u_k^1) + V_1 u_k^1$

- podobnie

- dla węzła  $j = 18$  sąsiad z prawej strony  $\Psi_k^{l=0,j=19} = \Psi_k^{l=1,j=1} = \exp(ikR)u_k^1$   
 $H\Psi_k^{l=0,j=18} = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2} (u_k^{17} + \exp(ikR)u_k^1 - 2u_k^{18}) + V_{18} u_k^{18}$

# problem o symetrii translacyjnej

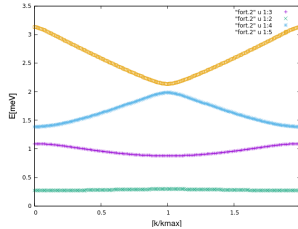
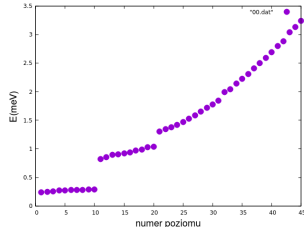


- macierz Hamiltona w pierwszej komórce  $H\Psi_k^{j=0} = H u_k = E_k u_k$
- dla  $j \neq 1, j \neq 18$ :  $H u_k^j = t \left( u_k^{j-1} + u_k^{j+1} - 2u_k^j \right) + V(j)u_k^j$  przy  $t = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2}$
- dla  $j = 1$ :  $H\Psi_k^{j=0, j=1} = t \left( u_k^{18} \exp(-ikR) + u_k^2 - 2u_k^1 \right) + V_1 u_k^1$
- dla  $j = 18$ :  $H\Psi_k^{j=0, j=18} = t \left( u_k^{17} + \exp(ikR)u_k^1 - 2u_k^{18} \right) + V_{18} u_k^{18}$
- forma macierzowa
- $$\begin{pmatrix} -2t + V_1 & t & 0 & \dots & 0 & t \exp(-ikR) \\ t & -2t + V_2 & t & \dots & 0 & 0 \\ 0 & t & -2t + V_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ t \exp(ikR) & 0 & 0 & \dots & t & -2t + V_{18} \end{pmatrix}$$



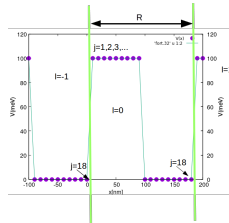
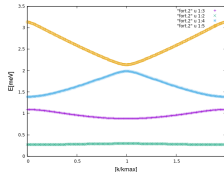
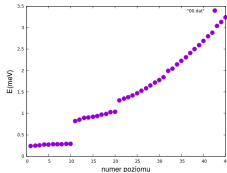
# problem o symetrii translacyjnej

- po lewej "kryształ z 9 studni", po prawej  $\infty$  studni

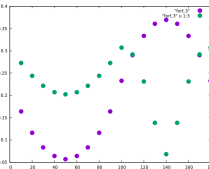
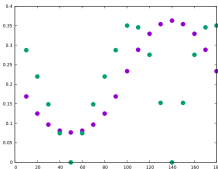


- $k_{max} = \frac{\pi}{R}$ ,  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- $\exp(i(k + 2k_{max})R) = \exp(ikR)$ , dla  $2k_{max}R = 2\pi$

# problem o symetrii translacyjnej



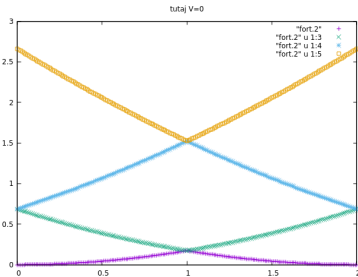
- $k = 0$  oraz  $k = 0.5k_{max}$ ,  $|u|$  (najniższe pasmo - fiolet, następne - zieleń)



- $k_{max} = \frac{\pi}{R}$ ,  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- $\exp(i(k + 2k_{max})R) = \exp(ikR)$ , dla  $2k_{max}R = 2\pi$

# problem o symetrii translacyjnej

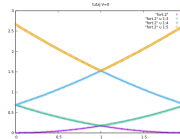
- $k_{max} = \frac{\pi}{R}$ ,  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- $\exp(i(k + 2k_{max})R) = \exp(ikR)$ , dla  $2k_{max}R = 2\pi$



- warunki periodyczne bez potencjału
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $\frac{\hbar^2 (k \pm n 2k_{max})^2}{2m}$
- dla cząstki w próżni znamy relację dyspersji:  $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- związek rozwiązania z danym  $k$  a pozostałymi pasmami

# cząstka w próżni

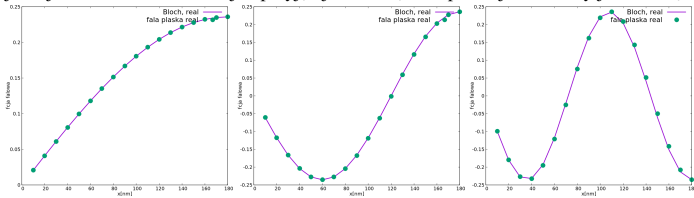
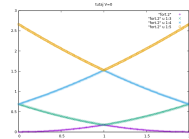
- $k_{max} = \frac{\pi}{R}$ ,  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- $\exp(i(k + 2k_{max})R) = \exp(ikR)$ , dla  $2k_{max}R = 2\pi$



- porównanie: warunki periodyczne bez potencjału
- dla cząstki w próżni wiemy  $\exp(\pm iKx)$ , z  $E_{\pm K} = \frac{\hbar K^2}{2m}$  oraz  $p_{\pm K} = \pm \hbar K$
- natomiast  $\pm \hbar k$  nie jest pędem.  $\pm \hbar k$  kwazipędem lub pędem krystalicznym
- kwazipęd:  $k + G$  oraz  $k$  są równoważne, gdy  $G$  wektor sieci odwrotnej
- w jednym wymiarze  $G = n \frac{2\pi}{R}$

# cząstka w próżni

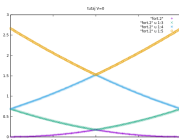
- $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- dla cząstki w próżni wiemy  $\exp(\pm iKx)$ , z  $E_{\pm K} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$
- $\pm \hbar K$  to pęd, natomiast  $\pm \hbar k$  to kwazipęd
- nakładamy na próżnię warunek periodyczności
- poniżej funkcje  $u_k$  z diagonalizacji dla 3 najniższych pasm dla  $k = k_{max}/2 = \pi/(4R)$ , w ramach jednej "komórki elementarnej" - przyjętej bez związku z potencjałem, który jest 0 wszędzie



- na rysunkach: części rzeczywiste  $u_k(x)$  (z diagonalizacji, krzywe pt "Bloch" na rysunkach) oraz część rzeczywista fali płaskiej  $u_k(0) \exp(iK_l x)$ , przy czym  $K_l = \pm \sqrt{\frac{2mE_l}{\hbar^2}}$  dla pierwszego (lewy), drugiego (środkowy) i trzeciego (prawy) pasma (diagonalizacja produkuje stany własne o niekontrolowalnym czynniku fazowym).
- wstawione do równania  $k = \pi/(4R)$ , ma wpływ wyłącznie na formę periodycznych warunków brzegowych dla  $u_k$ , nie na sens całego rozwiązania  $\Psi_k$ .
- związki:  $K_1 = k$ ,  $K_2 = (k - G)$ ,  $K_3 = k + G$ , gdzie  $G = \frac{2\pi}{R}$

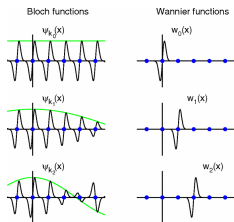
# cząstka w próżni

- $\Psi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$ , gdzie  $u_k(x + R) = u_k(x)$
- $\Psi_K(x) = \exp(iKx)$
- pęd  $K$  i kwazipęd  $k$



- związki:  $K_1 = k$ ,  $K_2 = (k - G)$ ,  $K_3 = k + G$ , gdzie  $G = \frac{2\pi}{R}$
- $K$  dla cząstki w próżni decyduje o kierunku ruchu,  $k$  - nie
- kierunek ruchu elektronów, zgodny ze znakiem, prędkość pasmowa  $v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$

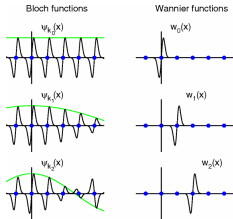
# funkcje Blocha i Wanniera



- Marzari et al. Rev. Mod. Phys. **84** (2011)

- funkcje Blocha (zdelokalizowane) i Wanniera (zlokalizowane na jonie)
- Wanniera - zbliżone do orbitali atomowych
- Bloch  $\Psi_{\mathbf{k}} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Wannier:  $\Psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- $\langle \Psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) | \Psi_{\mathbf{R}'}(\mathbf{r}) \rangle = \delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$

# metoda ciasnego wiązania



• Marzari et al. Rev. Mod. Phys.

- rozwiązanie równania Schroedingera w bazie orbitali atomowych (LCAO) [funkcji Wanniera]

- stany własne kryształu:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) - E\right)\Psi(\mathbf{r}) = 0$$

- $U(r) = \sum_n V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$  jest sumą potencjałów atomowych (+ zależnie od przybliżenia elementów oddziaływania elektron-elektron)

- chcemy znaleźć  $\Psi$  w bazie orbitali atomowych [funkcji Wanniera]  $\Psi = \sum_{mn} c_{mn}\Psi_{\mathbf{R}}^m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ ,

- tutaj dodatkowo -  $m$  numeruje orbitale atomowe

- po wstawieniu  $\Psi$  do równania Schroedingera i wyrzutowaniu na orbitale atomowe (funkcje Wanniera) dostajemy

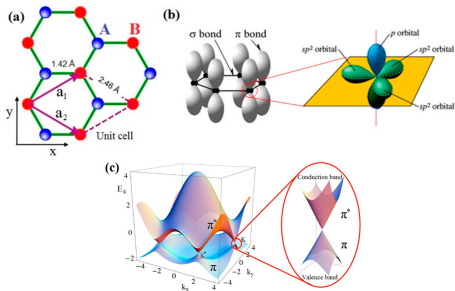
- $\mathcal{H}\Psi = E\Psi$

- elementy macierzowe  $H_{mn,m'n'} =$

$$E_m\delta_{m,m'}\delta_{n,n'} + \langle\Psi_{\mathbf{R}}^m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)|H|\Psi_{\mathbf{R}}^{m'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'})\rangle = E_m\delta_{m,m'}\delta_{n,n'} + t_{m,n,m'n'}$$

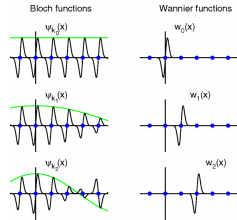
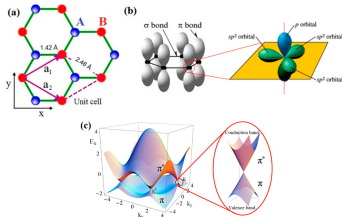


# funkcje Blocha i Wanniera



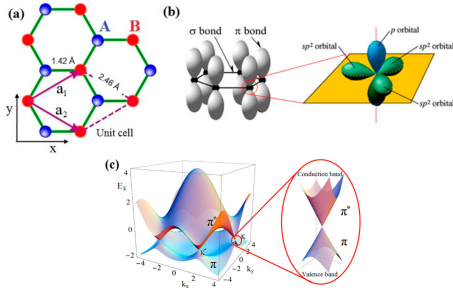
- dwie podsieci trójkątne (A,B) - ewentualnie sieć trójkątna z bazą
- W okolicach punktu neutralności ładunkowej na powierzchni Fermiego - orbitale  $p_z$  (tylko 1 orbital na jon sieci, niższe stany tworzą silniejsze wiązania i nie podlegają zmianom).

# metoda ciasnego wiązania dla grafenu



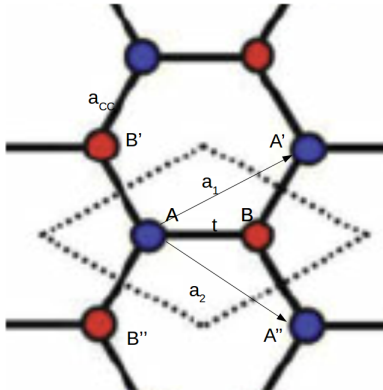
- $$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) - E\right)\Psi(\mathbf{r}) = 0$$
- $$\psi = \sum_n c_n p_{\mathbf{R}_n}^z(\mathbf{r}),$$
- założenia metody ciasnego wiązania  $\langle p_n | p_m \rangle = \delta_{mn}$  (jak dla funkcji Wanniera)
- $\langle p_n | H_C | p_m \rangle = E_{pz}$  dla  $m = n$
- $\langle p_n | H_C | p_m \rangle = t_{mn}$  dla jonów, których funkcje się przekrywają
- w najprostszej przybliżeniu  $t_{mn} = t$  dla najbliższych sąsiadów i 0 dla kolejnych.
- dla orbitali  $p_z$ ,  $t$  jest izotropowe.  $E_{pz} = 0$  (wybór poziomu odniesienia)

# metoda ciasnego wiązania



- komórka elementarna grafenu składa się z dwóch atomów A, B
- $\Psi_k^j(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_k^j(\mathbf{r})$
- $j = A, B$
- $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$
- $u_k^A(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_k^A(\mathbf{r})$
- $u_k^B(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_k^B(\mathbf{r})$

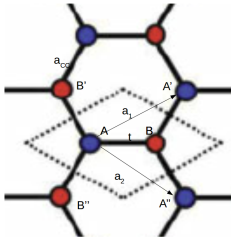
# metoda ciasnego wiązania



- komórka elementarna grafenu składa się z dwóch atomów A, B
- $\Psi_k^j(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_k^j(\mathbf{r})$
- $j = A, B$
- $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$
- $u_k^A(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_k^A(\mathbf{r})$
- $u_k^B(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_k^B(\mathbf{r})$

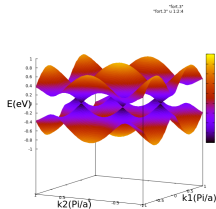
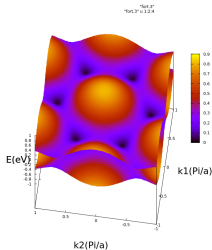
- $H\Psi^B = t\Psi^A + t\Psi^{A'} + t\Psi^{A''}$
- $H\Psi^B = t\Psi^A + t\Psi^A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + t\Psi^A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)$
- $H\Psi^A = t\Psi^B + t\Psi^{B'} + t\Psi^{B''}$
- $H\Psi^A = t\Psi^B + t\Psi^B \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + t\Psi^B \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1)$

# metoda ciasnego wiązania



- $H\Psi^B = t\Psi^A + t\Psi^A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + t\Psi^A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)$
- $H\Psi^A = t\Psi^B + t\Psi^B \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + t\Psi^B \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1)$
- $t = -2.7 \text{ eV}$ ,  $\mathbf{a}_1 = a \left( \sqrt{3}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$ ,  
 $\mathbf{a}_2 = a \left( \sqrt{3}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$ ,  $a = 0.246 \text{ nm}$

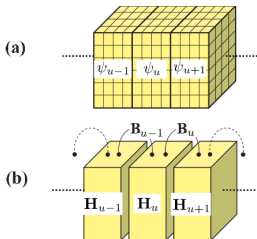
- $$\mathbf{H} \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & t(1 + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2)) \\ t(1 + \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_2)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix}$$



- w pasmach :  $\Psi^A = \pm \Psi^B$  - pseudospin
- w punktach  $K, K'$  - liniowa relacja dyspersji - fermiony Diraca
- grafen - półmetal, na rysunku po lewej widać sześciokątną strefę Brillouina

# periodyczne warunki brzegowe

- W poprzednim przykładzie: zakładamy  $k$  liczymy  $E$
- możliwe podejście odwrotne: zakładamy  $E$ , liczymy  $k$



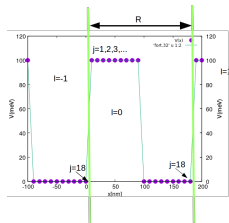
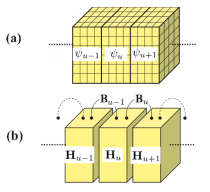
- B. Rzeszutarski (praca mgr) za M. Zwierzyckim, *physica status solidi (b)*, 245, 623 (2008)

- forma macierzowa

$$\mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B}_{u-2} & \mathbf{H}_{u-1} & \mathbf{B}_{u-1}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B}_{u-1} & \mathbf{H}_u & \mathbf{B}_u^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{u-2} \\ \Psi_{u-1} \\ \Psi_u \\ \Psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{H}_u$  - macierz Hamiltonianu wewnątrz jednego komórki elementarnej
- $\mathbf{B}_{u-1}$  macierz Hamiltonianu łącząca komórkę  $u - 1$  z  $u$

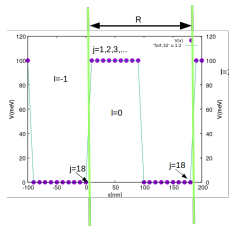
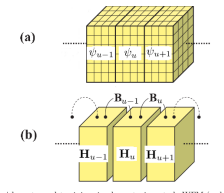
# periodyczne warunki brzegowe



$$\bullet \quad \mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B}_{u-2} & \mathbf{H}_{u-1} & \mathbf{B}_{u-1}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B}_{u-1} & \mathbf{H}_u & \mathbf{B}_u^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{u-2} \\ \Psi_{u-1} \\ \Psi_u \\ \Psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- dla układu periodycznego można opuścić indeks komórki  $u$  - bo wszystkie komórki są identyczne, potencjał powtarzalny, wiązania między komórkami podobne

# periodyczne warunki brzegowe

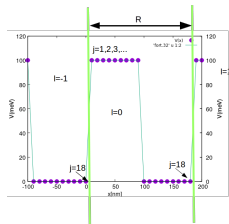
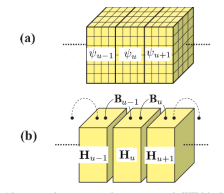


$$\bullet \mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{u-2} \\ \Psi_{u-1} \\ \Psi_u \\ \Psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- **H** - trójprzekątniowa jak poprzednio
- **B** - tylko jeden niezerowy element – który ?



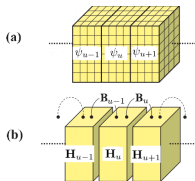
# periodyczne warunki brzegowe



$$\bullet \mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{u-2} \\ \psi_{u-1} \\ \psi_u \\ \psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{H}$  - trójprzekątniowa jak poprzednio, wymiar  $18 \times 18$
- $\mathbf{B} = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{1,18}$  - sąsiad z lewej punktu 1. uzupełnia trójpasmowość macierzy  $\mathcal{H}$

# periodyczne warunki brzegowe

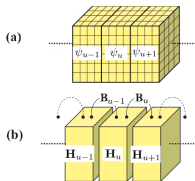


- forma tw. Blocha
- $\Psi_{u-1} = \chi, \Psi_u = \lambda\chi, \Psi_{u+1} = \lambda^2\chi$
- $\lambda = \exp(ikx)$

$$\mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{u-2} \\ \Psi_{u-1} \\ \Psi_u \\ \Psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- $\mathbf{H}$  - trójprzekątniowa jak poprzednio, wymiar  $18 \times 18$
- $\mathbf{B} = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{1,18}$  - sąsiad z lewej punktu 1

# periodyczne warunki brzegowe



- forma tw. Blocha
- $\Psi_{u-1} = \chi, \Psi_u = \lambda\chi, \Psi_{u+1} = \lambda^2\chi$
- $\lambda = \exp(ikx)$

$$\mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{u-2} \\ \Psi_{u-1} \\ \Psi_u \\ \Psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- $\mathcal{H}\Psi = E\Psi$
- dla  $u$ -tej komórki elementarnej:
- $\mathbf{B}\chi + \lambda\mathbf{H}\chi + \lambda^2\mathbf{B}^\dagger\chi = E\mathbf{I}\lambda\chi$
- $-\mathbf{B}\chi + \lambda(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})\chi - \lambda^2\mathbf{B}^\dagger\chi = 0$

## periodyczne warunki brzegowe

- $\Psi_{u-1} = \chi, \Psi_u = \lambda\chi, \Psi_u = \lambda^2\chi$
- $-\mathbf{B}\chi + \lambda(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})\chi - \lambda^2\mathbf{B}^\dagger\chi = 0$
- na wejściu: macierze, E (jak w problemach z ciągłej części widma)
- niewiadome:  $\chi, \lambda$  - jak to rozwiązać?

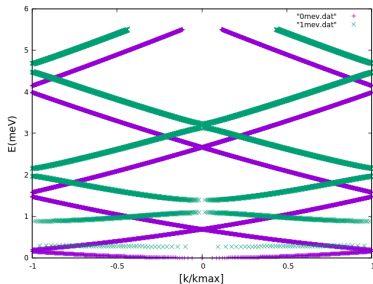
- $\Psi_{u-1} = \chi, \Psi_u = \lambda\chi, \Psi_{u+1} = \lambda^2\chi$
- $-\mathbf{B}\chi + \lambda(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})\chi - \lambda^2\mathbf{B}^\dagger\chi = 0$
- (1)  $\eta = \lambda\chi$
- (2)  $-\mathbf{B}\chi + (\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})\eta - \lambda\mathbf{B}^\dagger\eta = 0$

## periodyczne warunki brzegowe

- $-\mathbf{B}\chi + \lambda(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})\chi - \lambda^2\mathbf{B}^\dagger\chi = 0$
- (1)  $\eta = \lambda\chi$
- (2)  $-\mathbf{B}\chi + (\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})\eta - \lambda\mathbf{B}^\dagger\eta = 0$
- $$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{B} & \mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & \mathbf{B}^\dagger \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix}$$
- to jest tzw. uogólniony problem własny (standardowy, w bibliotekach numerycznych)
- $\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{S}\mathbf{v}$
- wartości własne mogą być zespolone, bo macierze  $\mathbf{A}, \mathbf{S}$  nie są hermitowskie
- tyle rozwiązań własnych jak i rozmiar macierzy, tj.  $2n$
- tylko nie które z nich mają akceptowalną formę (skończoną w całym układzie)
- dla każdej energii  $E$  szukamy takich wartości własnych które mają formę  $\lambda = \exp(ikR)$ , z tego liczymy  $k = \frac{\ln \lambda}{iR}$ ,  $k$  rzeczywiste gdy  $|\lambda| = 1$  – rozwiązanie jest akceptowalne

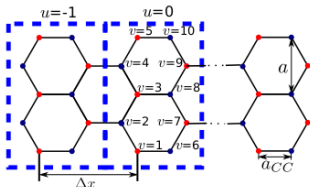
# periodyczne warunki brzegowe

- $$\left[ \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{B} & E\mathbf{I} - \mathbf{H} \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & \mathbf{B}^\dagger \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
- $\lambda = \exp(ikR)$ ,  $|\lambda| = 1$ , z tego liczymy  $k = \frac{\ln \lambda}{iR}$



- dla pewnych wartości  $E$  nie znajdujemy rozwiązań w formie Blocha

- ostatni przykład, większa komórka elementarna: nanowstęga

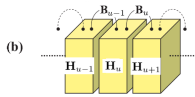
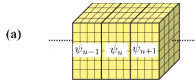


- Szafran, Phys. Rev. B 90, 035314 (2014)
  - komórka elementarna - tutaj złożona z 10 atomów
  - twierdzenie Blocha  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)\phi_k(x)$ , gdzie  $\phi_k(x + \Delta x) = \phi_k(x)$
  - poszukamy rozwiązania w formie  $\Psi_k^{u,v} = \exp(iku\Delta x)\phi_k^v$

A. Mreńca, K. Kolasiński, B.

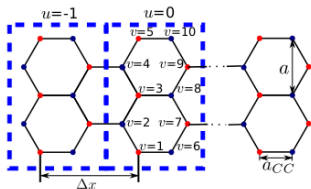


# periodyczne warunki brzegowe



- forma tw. Blocha
- $\Psi_{u-1} = \chi, \Psi_u = \lambda\chi, \Psi_{u+1} = \lambda^2\chi$
- $\lambda = \exp(ikx)$

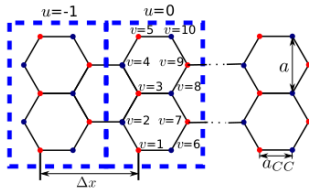
$$\mathcal{H}\Psi = \begin{pmatrix} \ddots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \mathbf{B} & \mathbf{H} & \mathbf{B}^\dagger & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{u-2} \\ \Psi_{u-1} \\ \Psi_u \\ \Psi_{u+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$



- 

- twierdzenie Blocha  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)\phi_k(x)$ , gdzie  $\phi_k(x + \Delta x) = \phi_k(x)$

- $\mathbf{H} = \left( \begin{array}{c|cccccccccc} v/v' & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ \hline 1 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t \\ 10 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & 0 & 0 & t & 0 \end{array} \right)$



- 
- $\mathbf{B}_{2,7} = \mathbf{B}_{4,9} = t$ , pozostałe elementy - zerowe
- poniżej  $E(k)$  po lewej dla metalicznej wstęgi fotelowej (armchair)  $n = 5$  atomów w poprzek i półprzewodnikowej  $n = 15$  atomów w poprzek. Brak przerwy jeśli  $(n + 1)$  jest wielokrotnością 3.

