

Band structure & Density of States ساختار نواری و چگالی حالت

اهمیت وجود الکترون : دو ذره اصلی که تشکیل دهنده ماده اند، هسته و الکترون اند. نقش الکترون چشم گیرتر از نقش هسته است. الکترون ها در مواد ۲ نقش دارند :

۱- چسب کوانتومی (quantum glue) : هسته ها را در فواصل منظمی در بلور کنار هم قرار می دهند. ← تشکیل بلور

۲- عمده خواص استیکی، مغناطیسی و ... ناشی از وجود الکترون است.

فهم فیزیک الکترون ها در جامدات نانو کدی فهم فیزیک نانو یا نانوفیزیک



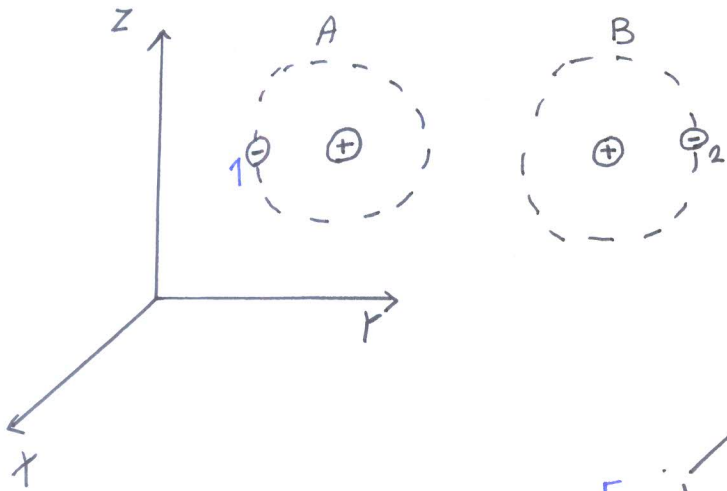
مقدم اول : بررسی مولکول H_2

مقدم بعدی : زنجیر ایسی خطی



بررسی مولکول H_2

(جزء مولکول H_2 تسکلی می شود)



از برهم کنش الکترون-الکترون صرف نظر می کنیم. از تقریب بورن اینها بر استفاده می کنیم. حل مسئله آسان می شود.

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$H = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_A|} \right) + \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_B|} \right) - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_B|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_A|}$$

علاقه مندیم : حل مسئله را به کامپیوتر بسپاریم و با کمترین تلاشی این مسئله را حل کنیم
 بدین منظور باید basis set ای را انتخاب کنیم

$$H = H_A + H_B - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_B|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_A|}$$

H_A و H_B هامیلتونی اتم های ایزوله A و B است. پس داریم :

$$H_A |1\rangle = \epsilon_{1s} |1\rangle$$

$$H_B |2\rangle = \epsilon_{1s} |2\rangle$$

تابع موج درست را بسازیم

حال تابع موج الکترون که علامه مندم به دست آوریم بر حسب توابع موج دوست داستنی
 بسط می دهیم (بر حسب توابع پایه می نویسیم)

$$|\psi\rangle = \sum_i^2 \psi_i |i\rangle = \psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle$$

این روش برای بسط تابع موج به اوربیتال های مولکولی یک تئوری نامیده می شود:

تئوری اوربیتال های مولکولی (Molecular orbital theory) MO

این روش معمولاً به نام زیربنز ساختنه می شود:

LCAO (Linear combination of Atomic orbital Theory)

معادله شرودینگر

$$\mathcal{H}(\psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle) = E(\psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle)$$

برای حل ، معادله شرودینگر را به توابع پایه $|1\rangle$ و $|2\rangle$ تصویر می کنیم
(تصویر کردن معادله شرودینگر بر توابع پایه)

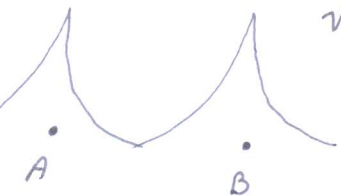
$$\langle 1 | \mathcal{H}(\psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle) = E \langle 1 | (\psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle)$$

$$\langle 2 | \mathcal{H}(\psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle) = E \langle 2 | (\psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle)$$

پراتز : توابع پایه ما متعامدند. $\langle 1 | 2 \rangle = \langle 2 | 1 \rangle = 0$ $\langle 1 | 1 \rangle = \langle 2 | 2 \rangle = 1$

$$\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-r/a_0}$$

در فضای حقیقی



پایه های ما متعامد هستند به شرطی اتم های

H به اندازه ای کافی از هم دور باشند.

در نهایت به این دو معادله می‌رسیم

$$\langle 1|H|1\rangle \psi_1 + \langle 1|H|2\rangle \psi_2 = E \psi_1$$

$$\langle 2|H|1\rangle \psi_1 + \langle 2|H|2\rangle \psi_2 = E \psi_2$$

↓ بازنویسی

$$\epsilon_0 \psi_1 + \gamma \psi_2 = E \psi_1$$

$$\gamma \psi_1 + \epsilon_0 \psi_2 = E \psi_2$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \gamma \\ \gamma & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

↓

مستقیم است.
 $\epsilon_0 = \epsilon_{1s} - E_{cf}$

لا مقداری منفی است.

$$H \psi = E \psi$$

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \gamma \\ \gamma & \epsilon_0 \end{pmatrix}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

حل ماتریس:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & \gamma \\ \gamma & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\det \begin{pmatrix} \epsilon_0 - E & \gamma \\ \gamma & \epsilon_0 - E \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow (\epsilon_0 - E)^2 - \gamma^2 = 0$$

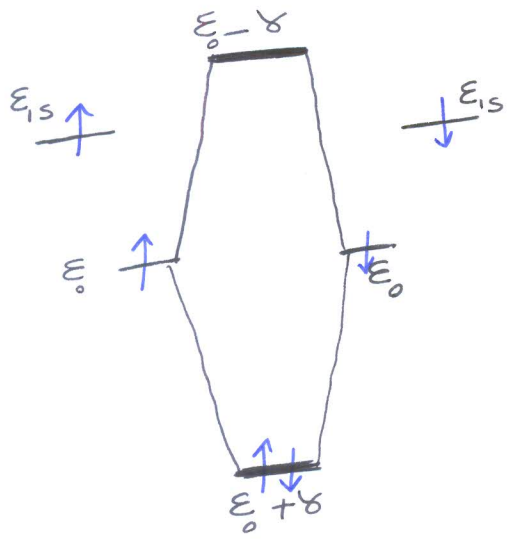
دو حل دارد

$$E_{\text{bond}} = \epsilon_0 + \gamma$$

$$E_{\text{anti}} = \epsilon_0 - \gamma$$

$$\psi_{\text{bond}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

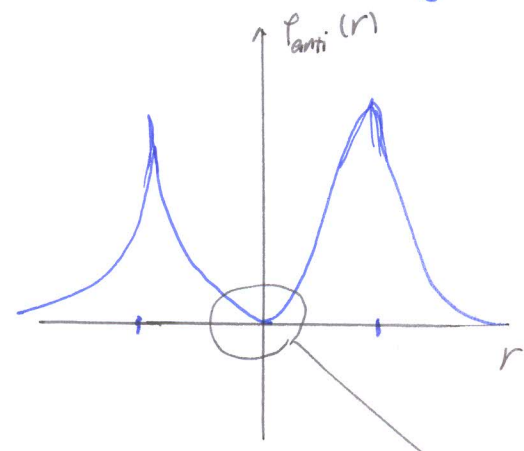
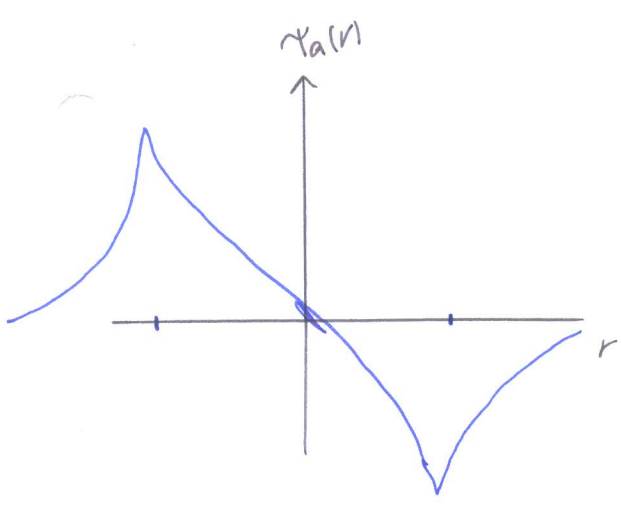
$$\psi_{\text{anti}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$



حرا H_2 نسلیل می شود؟

حالت

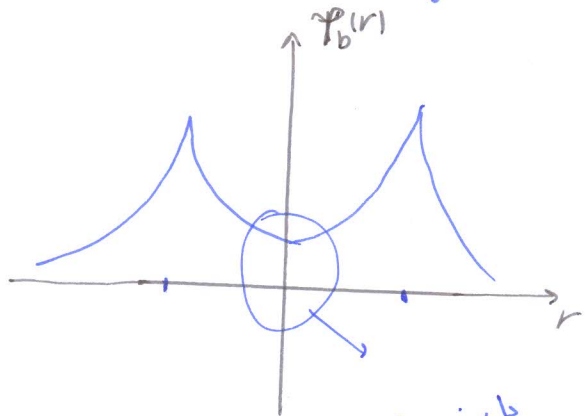
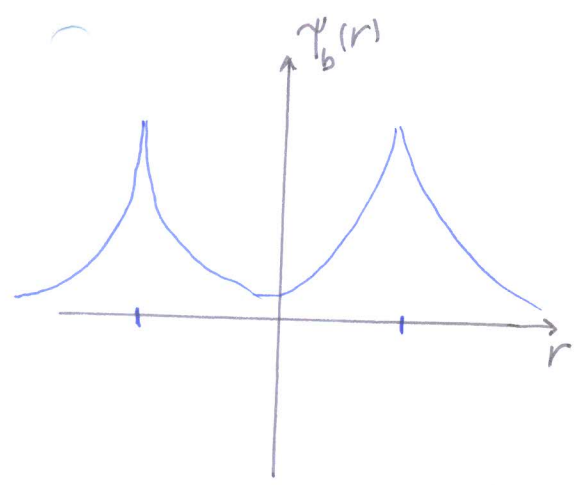
Antibonding



جاری بین دو اتم قرار ندارد یعنی پیوند نداریم.

حالت

Bonding



جاری بین دو اتم قرار دارد یعنی پیوند داریم.

هامیلتونی عمومی جامرات

هامیلتونی برای ذره‌های

$$H \Psi = E \Psi$$

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^{N_n} \vec{p}_i^2 + \frac{1}{2M_0} \sum_{j=1}^{N_e} \vec{p}_j^2 + \frac{Z^2}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^{N_n} V_C(\vec{R}_i - \vec{R}_j) - Z \sum_{i=1}^{N_n} \sum_{j=1}^{N_e} V_C(\vec{r}_j - \vec{R}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^{N_e} V_C(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

انرژی جنبشی هسته‌ها انرژی جنبشی الکترون‌ها برهم‌کنش کولنی بین هسته‌ها

برهم‌کنش کولنی الکترون‌ها برهم‌کنش کولنی الکترون‌ها و هسته‌ها

\vec{R}_i = مکان هسته‌ها

\vec{r}_j : مکان الکترون‌ها

$\vec{p} = -i\hbar \nabla_R$ عملگر تکانه‌ای هسته‌ها

$\vec{p} = -i\hbar \nabla_r$ عملگر تکانه‌ای الکترون‌ها

در این فرمول :

$$V_C(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|}$$

حل این معادله‌ی شرودینگر ← سیستمی است که خواص یک سیستم

اما حل این معادله‌ی شرودینگر غیر ممکن است ؟ چرا ؟

ج : در یک جامد ماکروسکوپی تعداد 10^{23} هسته وجود دارد و در ساده‌ترین حالت 10^{23} الکترون هم . به علت جمله کولنی برهم‌کنش الکترون الکترون امکان جدا سازی به معادلات مستقل وجود ندارد . در واقع باید تعداد بسیار زیادی معادله‌ی وابسته به هم را حل کنیم که غیر ممکن است و منطقی هم نیست .

استفاده از تقریب

۱ - غیر از عناصر سبک (سبک‌ترین عناصر) هسته‌ها نوعاً $10^4 - 10^5$ برابر از الکترون‌ها سنگین‌تر هستند در نتیجه دینامیک آنها خیلی آهسته‌تر از الکترون‌ها است.



می‌توان از انرژی جنبشی هسته‌ها صرف نظر کرد.

۲ - صرف نظر از برهمکنش کولنی الکترون‌ها به طریقی

چگونه طریقی ← در نظر گرفتن برهمکنش الکترون‌ها بصورت میانگین



جداسازی متغیرهای الکترونی

همپلیتونی سی ذره‌ای با این در تقریب تبدیل می‌شود به :

$$H_e = \frac{1}{2m_0} \sum_{j=1}^{N_e} \vec{p}_j^2 + \sum_{i=1}^{N_n} \sum_{j=1}^{N_e} V_{at} (\vec{r}_j - \vec{R}_i)$$

$$= \sum_{j=1}^{N_e} \left[\frac{\vec{p}_j^2}{2m_0} + \sum_{i=1}^{N_n} V_{at} (\vec{r}_j - \vec{R}_i) \right] = \sum_{j=1}^{N_e} H_{e_j}$$

در اینجا بیانگرهای برهمکنش الکترون-الکترون و الکترون هسته با جمله V_{at} جانشین شده است.

در ادامه باید این معادله را در دسترس را حل کنیم :

$$H_e |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle$$

قدم بعدی : حل معادله شرودینگر $H_k |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle$

تعیین $|\psi_k\rangle$

بدون دانستن شکل دقیق پتانسیل V_{at} حل معادله شرودینگر با هامیلتونی

$$H_i = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \sum_{l=1}^{N_i} V_{at}(\vec{r} - \vec{R}_l)$$

در اینجا آنچه مستقیم بوانیم :

برای حالت های الکترون اتم ها چه اتفاقی می افتد وقتی در کنار یکدیگر یک جامد را تشکیل می دهند ؟

فرض می کنیم الکترون ها قویاً مقید هستند یعنی پتانسیل V_{at} قوی

استفاده از تقریب تنگابند
 Tight-binding app.

TB

توجه : اینجا منظور ما بستگی الکترون ها به هم است و نه پیوند شیمیایی
 binding بین اتم ها
 bond

فرض اینکه جامد ما از اتم‌های ایزوله‌ای تشکیل شده است که برهم‌کنش ضعیفی با هم دارند.

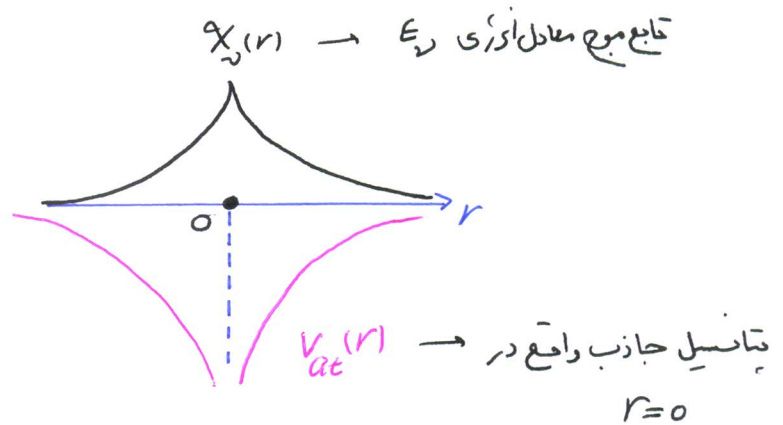
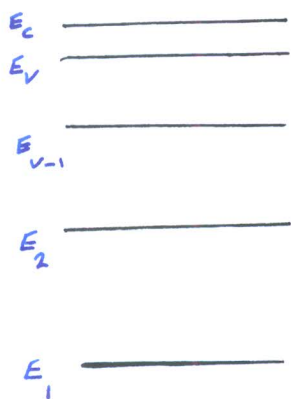
حل کوانتومی با حل معادله‌ی شرودینگر تک‌اتمی (single atom) آغاز می‌شود.

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_{at}(\vec{r}) \right] \chi_n(\vec{r}) = E_n \chi_n(\vec{r})$$

حالتی را فرض می‌کنیم که V_{at} معادل پتانسیل اتم خنثی است که ویژه‌حالت‌های آن از کمترین انرژی عبارتند از:

$$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots, E_N$$

که توسط Z الکترون اشغال شده است.



- حالت‌های الکترونی‌ای از جامد را در نظر می‌گیریم که مربوط به آخرین حالت الکترونی اشغال شده از اتم خنثی باشد (حالت والانس) با انرژی E_n و تابع موج χ_n

- $\chi_n(\vec{r} \rightarrow \vec{R}_n)$ ویژه‌توانی با انرژی E_n معادل حالت‌های اتمی واقع شده در جایگاه‌های مختلف \vec{R}_n باشد.

توابع $\psi_k(\vec{r})$ به صورت ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی $\chi_{\nu}(\vec{r}-\vec{R}_n)$ قابل

بیان است:

(LCAO) Linear Combination of the Atomic Orbitals

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} \chi_{\nu}(\vec{r}-\vec{R}_l)$$

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} |\vec{R}_l\rangle$$

k ← عدد کوانتومی

$a_{k,l}$ ← ضرایب ترکیب خطی
مقادیر مورد نیاز تعیین می‌شود.

در ادامه فرم دقیق $|\vec{R}_l\rangle$ از اهمیت کمی برخوردار خواهد بود.

هدف ما توصیف روش‌های برای تعیین ویژه توابع ویژه مقادیر است.

هدف: یافتن توابع ویژه و مقادیر ویژه هامیلتونی در تقریب تنگابست

گام اول:

$$H_l |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle$$

وارد کردن تابع موج به صورت ترکیب خطی از $|R_l\rangle$ ها

$$\sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} H_l |\vec{R}_l\rangle = \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} E_k |\vec{R}_l\rangle$$

گام دوم: جدا کردن تنگابست

اتم در جایگاه l (site) ←
همه جایگاه‌های دیگر ←

$$H_l |\vec{R}_l\rangle = E_0 |\vec{R}_l\rangle + V_l(\vec{r}) |\vec{R}_l\rangle \quad \square$$

$$V_l(\vec{r}) = \sum_{m=1, m \neq l}^{N_n} V_{at}(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$\sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} [E_v |\vec{R}_l\rangle + V_l(\vec{r}) |\vec{R}_l\rangle] = \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} E_k |\vec{R}_l\rangle$$

به منظور ساده سازی محاسبات

فرض می‌کنیم که $|\vec{R}_l\rangle$ مصبوعی متعامد به‌هم‌بنا باشد

(orthonormal set)

$$\langle \vec{R}_n | \vec{R}_l \rangle = \delta_{n,l}, \quad \begin{cases} 1 & l=n \\ 0 & \text{دیگر} \end{cases}$$

ضرب طرفین در $\langle \vec{R}_n |$ و معرفی انتقال $\langle \vec{R}_n |$ به اشتغال پرش:
 hopping transfer

$$-t_{n,l} = \langle \vec{R}_n | V_l(\vec{r}) | \vec{R}_l \rangle$$

$$\langle \vec{R}_n | \times \left[\sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} [E_v |\vec{R}_l\rangle + V_l(\vec{r}) |\vec{R}_l\rangle] = \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} E_k |\vec{R}_l\rangle \right]$$

$$\sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} \left[\underbrace{\langle \vec{R}_n | E_v | \vec{R}_l \rangle}_{E_v \delta_{nl}} + \langle \vec{R}_n | V_l(\vec{r}) | \vec{R}_l \rangle \right] = \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} \underbrace{\langle \vec{R}_n | E_k | \vec{R}_l \rangle}_{E_k \delta_{nl}}$$

$$E_v a_{k,n} + \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} \langle \vec{R}_n | V_l(\vec{r}) | \vec{R}_l \rangle = E_k a_{k,n}$$

$$-\sum_{l=1}^{N_n} t_{n,l} a_{k,l} = (E_k - E_v) a_{k,n}$$

n از 1 تا N_n می‌تواند تغییر کند.

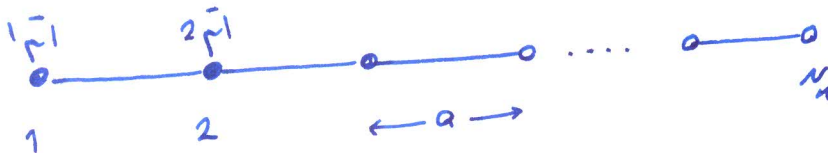
$$F_{n,l} > 0$$

- ما در نهایت این معادله ی شرودینگر را به دست می آوریم
مسئله ی ویژه مقادیر ماتریسی تبدیل می کنیم

چرا زنجیر اتمی خطی؟

- ۱- ساده‌ترین مثال برای فهم مسطحه‌های حالت‌های الکترونی
- ۲- فهم مسطحه‌های رسانا‌های شبه یک‌بعدی (quasi-1D conductors)
- ۳- تقسیم به موارد واقعی

چگونه یک زنجیر اتمی خطی را معرفی می‌کنیم؟

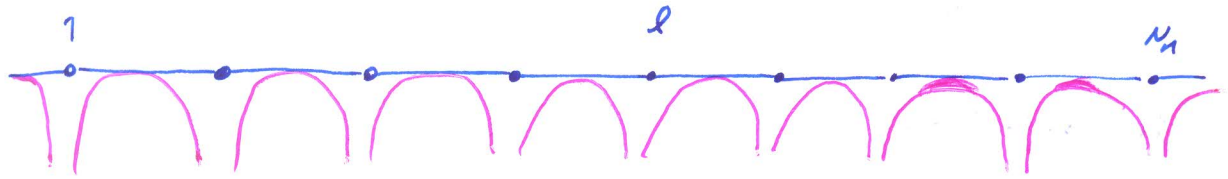


$$\vec{R}_m = R_m \vec{x} = R_m \hat{i}$$

$$R_m = m a \rightarrow \text{فاصله سبده} / c \quad (\text{Lattice constant})$$

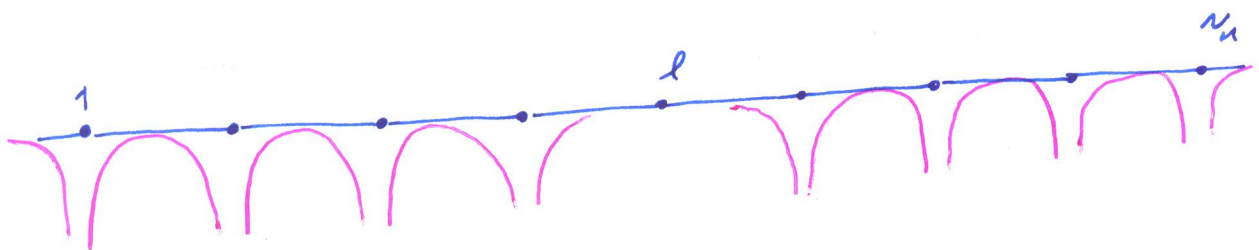
□ نمایش گرافیکی پتانسیل کل در رابطه ی $H_1 = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \sum_{l=1}^{N_n} V_{at}(\vec{r} - \vec{R}_l)$

که عبارت است از جمع پتانسیل های اتسی واقع در جایگاه های زنجیر اتسی



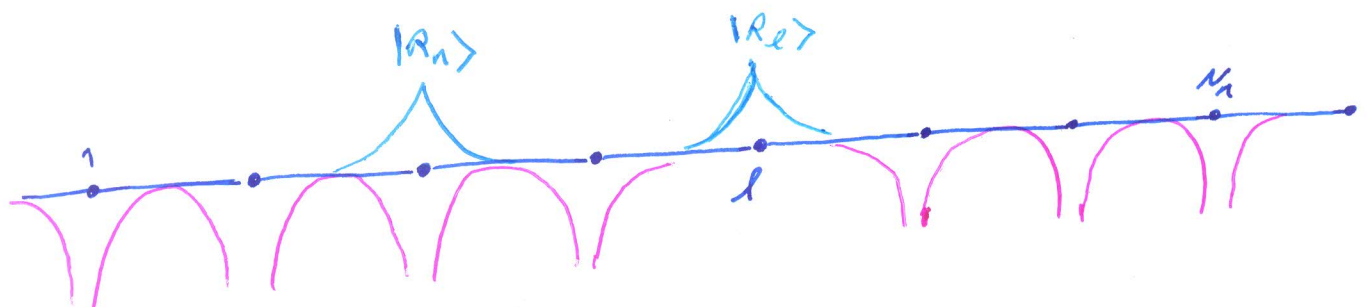
□ نمایش $V_l(r)$ با برداشتن (فرونشاندن) $V_{at}(\vec{r} - \vec{R}_l)$

$$V_l(\vec{r}) = \sum_{m=1, m \neq l}^{N_n} V_{at}(\vec{r} - \vec{R}_m)$$



□ تداوع موج واقع در جایگاه های n, l و $t_{n,l}$ برای محاسبی انتقال

$$-t_{n,l} = \langle \vec{R}_n | V_l(\vec{r}) | \vec{R}_l \rangle$$



- شروط مرزی تناوبی و قانون بلوخ

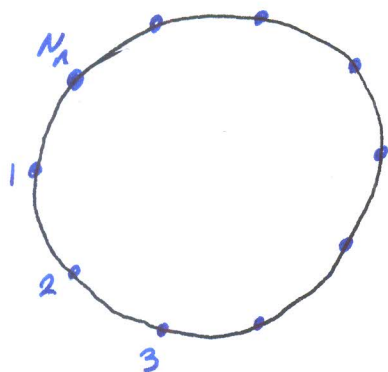
periodic boundary conditions
and Bloch's Theorem.

در رابطی
$$-\sum_{l=1}^{N_n} t_{n,l} a_{k,l} = (\epsilon_k - \epsilon_l) a_{k,n}$$
 اگر $t_{n,l}$ ها را نادانم

تحلیل سرراست نیست. حتی با دانستن این ضرایب نیز حل برای یک زنجیر محدود با N_n جایگاه به خاطر اثرات ناشی از نقاط پایانی زنجیر پیچیده است.

↓ راه حل

تبدیل هندسی خطی زنجیراتی به حلقه (Ring) به طریقی که جایگاه ۱ و N_n به اندازه‌ی یک ثابت شبکه a با هم فاصله داشته باشند.



↓ اشکال

هندسه‌های مختلف ← مشخصه‌های مختلف

↓ راه حل

حد ترمودینامیکی (thermodynamic limit)

یعنی N_n خیلی بزرگ: در این صورت زاویه‌ی بین ۳ جایگاه دو هندسی حلقه‌ای به 180° نزدیک می‌شود و در هندسه معادل می‌شوند.

← کاری که در قسمت قبل انجام دادیم معادل اعمال شرط مرزی تناوبی روی زنجیر محدود است.



شرط تناوری

$$\psi_k(x + N_n a) \equiv \psi_k(x)$$

$$a_{k, n + N_n} = a_{k, n}$$

- زنجیراتی نسبت به انتقال به اندازه ی ضرایب از ثابت شده
ناورد است. (کلیسای است)

- تقارن در ψ و χ ← بستگی ضرایب $t_{n,l}$ فقط
به فاصله ی جایگاه n, l

$$t_{n,l} = t_{|n-l|}$$

- این ضرایب با فاصله به سرعت کاهش می یابند و تنها چند جمله باقی
می ماند.

□ در حالت های حلقه یا زنجیر با شرط تناوری می توانیم رابطه ی
شروdingر را بازنویسی کنیم به طریقی که جایگاه n را جدا
در نظر بگیریم و بقیه را با در نظر گرفتن همسایه های با فاصله ی
کلیسای جمع ببندیم.

$$-\sum_{l=1}^{N_n} t_{n,l} a_{k,l} = (E_k - E_v) a_{k,n} \leftarrow \text{رابطه ی شروdingر}$$

$$-\sum_{l=1}^{N_n} t_{n,l} a_{k,l} = (E_k - E_v) a_{k,n}$$

$$-t_{n,n} a_{k,n} - \sum_{l=1, l \neq n}^{N_n} t_{n,l} a_{k,l} = (E_k - E_v) a_{k,n}$$

$$t_{n,n} = t_0$$

$$-t_0 a_{k,n} - \sum_{m=1}^{\frac{N_n-1}{2}} (t_{n,n+m} a_{k,n+m} + t_{n,n-m} a_{k,n-m}) = (E_k - E_v) a_{k,n}$$

$$t_{n,n+m} = t_{n,n-m} = t_m$$

$$-t_0 a_{k,n} - \sum_{m=1}^{\frac{N_n-1}{2}} t_m (a_{k,n+m} + a_{k,n-m}) = (E_k - E_v) a_{k,n}$$

جانبداری مایل

$$-\sum_{l=1}^{\frac{N_n-1}{2}} t_l (a_{k,n+l} + a_{k,n-l}) = (E_k - E_v + t_0) a_{k,n}$$

قبل از حل رابطه ی قبلی :

تابع بلوخ : در سیستم های با پتانسیل تناوبی قانون بلوخ

نشان می دهد که ویژه توابع \hat{H}_k که توابع بلوخ نامیده می شوند به شکل زیر :

$$\psi_k(n) = e^{ikn} u_k(n), \quad u_k(n+a) = u_k(n)$$

خود u_k هم تناوبی است.

- در حالت های حلقه یا زنجیر با شرط مرزی تناوبی
الکترون های جدا از هم به فاصله a پتانسیل کریستالی یکسانی را حس می کنند.



همپلتونی H_k تحت انتقال به اندازه a ناورد است.

استفاده از توابع بلوخ و شرط تناوب برای نشان دادن کوانتیزه بودن k و جست آوردن $a_{k,n}$

$$|\Psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} |\vec{R}_l\rangle$$

$$u_k(n) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} e^{-ikn} \chi_{\nu}(n - R_l)$$

$$u_k(n+a) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} e^{-ika} e^{-ikn} \chi_{\nu}(n+a-R_l)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l} e^{-ika} e^{-ikn} \chi_{\nu}(n-R_{l-1}) \equiv u_k(n)$$

$\chi_{\nu}(n - (R_l - a))$

$$a_{k,l} = a_{k,l-1} e^{ika}$$

$$= a_{k,l-2} e^{ik2a}$$

$$\vdots$$

$$= a_{k,0} e^{ikla}$$

$$a_{k,l} e^{-ika} = a_{k,l-1}$$

$$a_{k,l} = a_{k,0} e^{ikla}$$

$$a_{k,0} e^{ikla - ika} = a_{k,0} e^{ik(l-1)a}$$

- شرط مرزی تناوبی :

$$a_{k,n+N_n} = a_{k,n}$$

$$a_{k,0} e^{ik(n+N_n)a} = a_{k,0} e^{ikna} \Rightarrow e^{ikN_n a} = 1$$

$$kN_n a = 2\pi m \rightarrow k = \frac{2\pi m}{N_n a}$$

صحيح

- به عبارتی تابع موج Ψ_k ← $a_{k,0} = 1$

$$a_{k,n} = e^{ikR_n} = e^{ikna}$$

- حل های برای تقریب همسایگی نزدیک

Solutions under the nearest-Neighbour Approximation

$$-\sum_{l=1}^{\frac{M_n}{2}-1} \tau_l (a_{k,n+l} + a_{k,n-l}) = (E_k - E_v + \tau_0) a_{k,n}$$

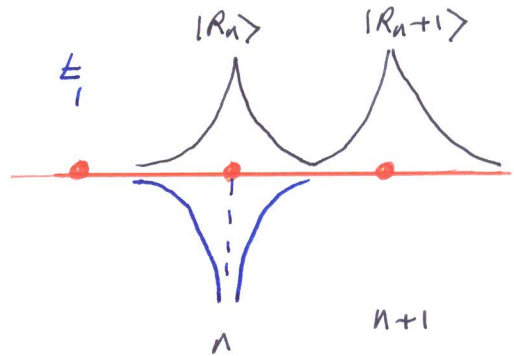
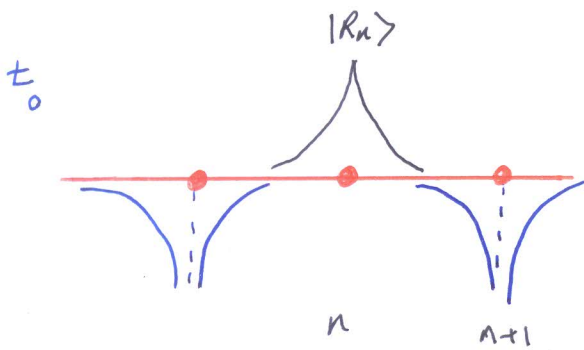
کاهش نمای مربع توانج مربع τ_0 با فاصله

در نظر گرفتن اشکال های پهن برای نزدیکترین همسایگی

(nearest-Neighbour Approximation)

یعنی

$$\tau_n = 0 \quad \text{if } |n| > 1$$



پتانسیل و توانج مربع در حالتی که τ_0 و τ_1 را داریم

اگر تقریب همسایه‌ی اول را در نظر بگیریم معادله شرودینگر به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد.

$$-t_1 (a_{k,n+1} + a_{k,n-1}) = (E_k - E_v + t_0) a_{k,n}$$

با استفاده از $a_{k,n} = e^{ikR_n} = e^{ikna}$

$$-t_1 (e^{ik(n+1)a} + e^{ik(n-1)a}) = (E_k - E_v + t_0) e^{ikna}$$

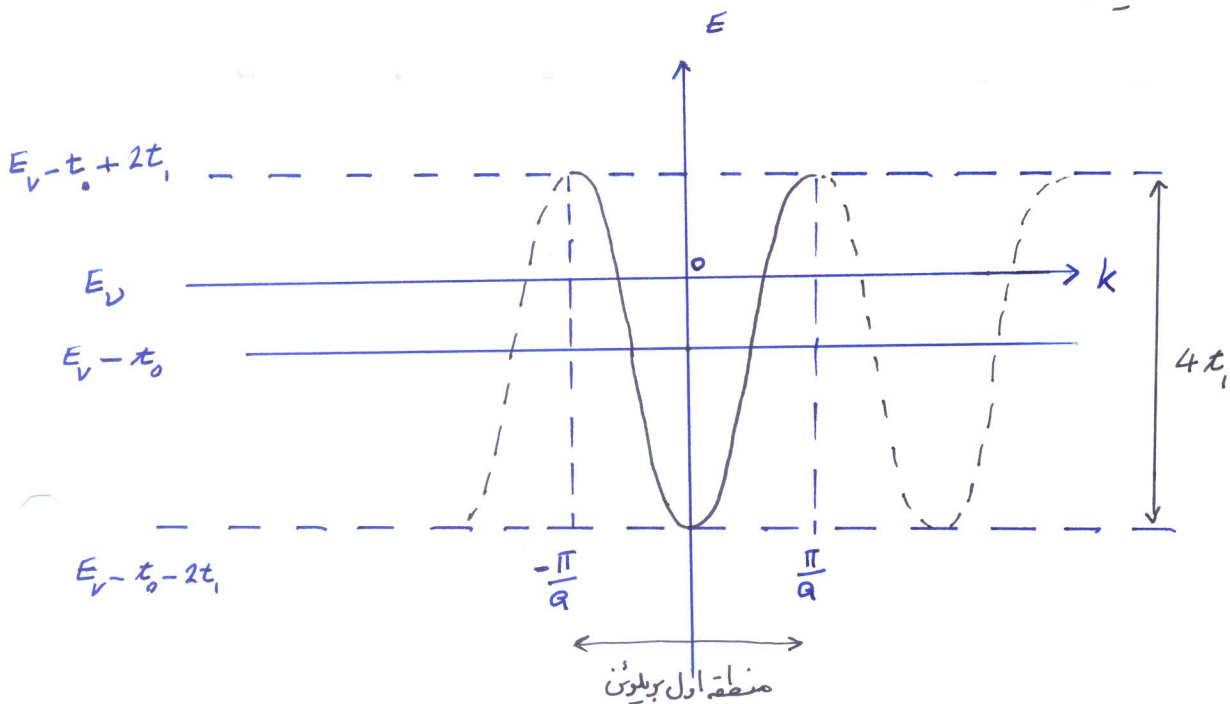
$$-t_1 (e^{ika} + e^{-ika}) = E_k - E_v + t_0$$

$$-t_1 (2 \cos ka) = E_k - E_v + t_0$$

دوره‌ی حالت‌های مربوط به دوره تناوب $|\psi_k\rangle$

$$E_k = E_v + t_0 - 2t_1 \cos ka$$

رسم دوره‌ی مقدار انرژی بر حسب اندیس گوانتومی k بدست آمده از تقریب TB



نکاتی در مورد این نتیجه که برای شرایط پیچیده تر مخصوصاً سیستم‌هایی با بعدی بیشتر از یک (2D & 3D) نیز می‌توان آن‌ها را به کار برد.

نکات:

(۱) - انتقال انرژی به اندازه t_0 از ترازهای اتمی E_0

- نواریهای انرژی مجاز $\leftarrow E_0 - t_0 + 2t_1 < E_k < E_0 - t_0 - 2t_1$
(allowed energy band)

- پهنای کل این نوار $\leftarrow 4t_1$
(width of band)

- تابع E_k بر حسب k ، ساختار نواری انرژی را نشان می‌دهد.
band structure

(۲) ویژه تابع انرژی E_k :

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} e^{ikla} |R_l\rangle$$

$$k + \frac{2\pi}{a} \rightarrow k \implies |\psi_k\rangle = |\psi_{k+\frac{2\pi}{a}}\rangle$$

در عمل برای نشان دادن این تابع تناوبی می‌توان k را در یک بازه انتخاب نمود:

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$$

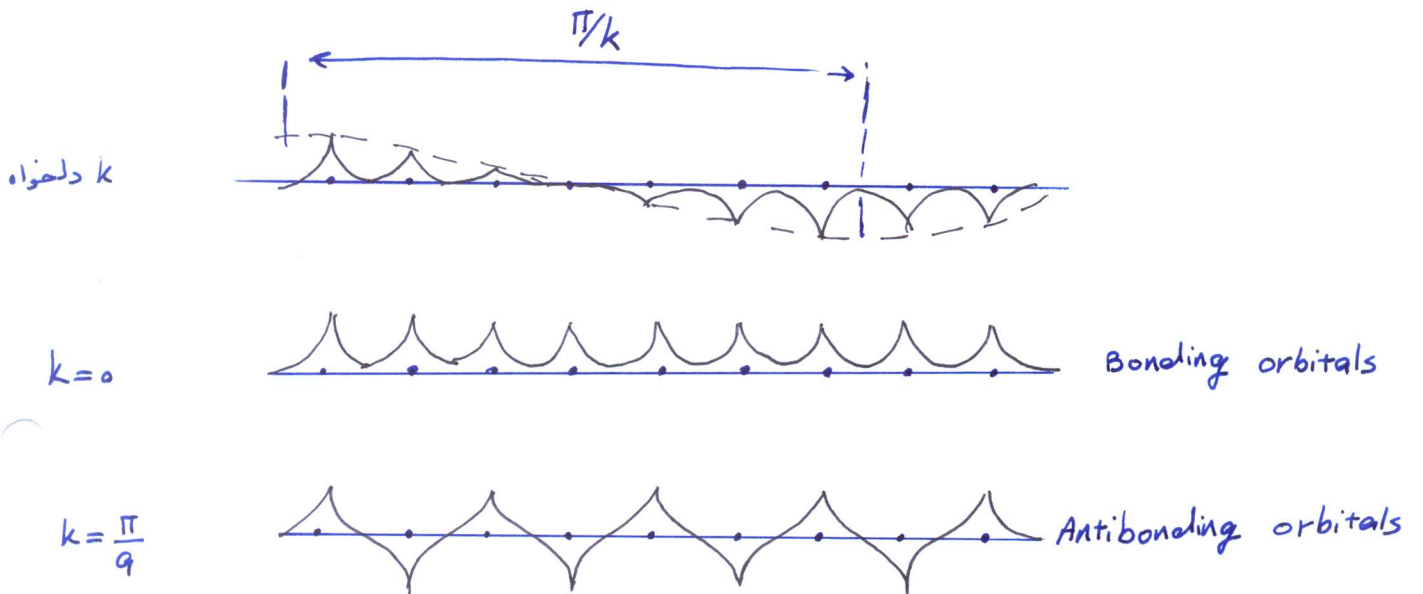
این بازه را منطقه اول بریلوین می‌نامیم.
(First Brillouin Zone)

- داشتن یک اوربیتال برای N_n فضای هیبریت بعد N_n دارد.

- همچنین رابطه $k = \frac{2\pi m}{N_n a}$ نشان می دهد که در بازه $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ N_n حالت وجود دارد.

(۳) نمایش مستحق حقیقی تابع موج ψ_k $|R_e\rangle$

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} e^{ikla} |R_e\rangle$$



Density of States (DOS)

- چگالی حالات

چگالی حالات Dos عبارت است از تعداد حالاتها بر واحد انرژی

number of states s per unit energy E

$$D(E) = \frac{ds}{dE} = \frac{ds}{dk} \cdot \left| \frac{dk}{dE} \right|$$

به کاربردن رابطه‌ی بالا برای زنجیر اتسی :

$$|E - E_0 + t_0| > 2|t_1| \longrightarrow D(E) = 0$$

در این بازه حالتی نداریم

در بقیه بازه دو جواب متقارن برای k وجود دارد.

$$|E - E_0 + t_0| < 2|t_1|$$

$$\cos k_1 a = - \frac{E - E_0 + t_0}{2t_1}$$

$$E_k = E_0 - t_0 - 2t_1 \cos ka$$

$$k = \frac{2m\pi}{N_1 a}$$

$$\frac{ds}{dk} = \frac{1}{\frac{2\pi}{N_1 a}} = \frac{N_1 a}{\pi}$$

- تعداد حالات بر واحد k

$$\frac{dk}{dE} = ?$$

$$\frac{dE_k}{dk} = 2a |t_1| \sin ka = 2a |t_1| \sqrt{1 - \cos^2 ka}$$

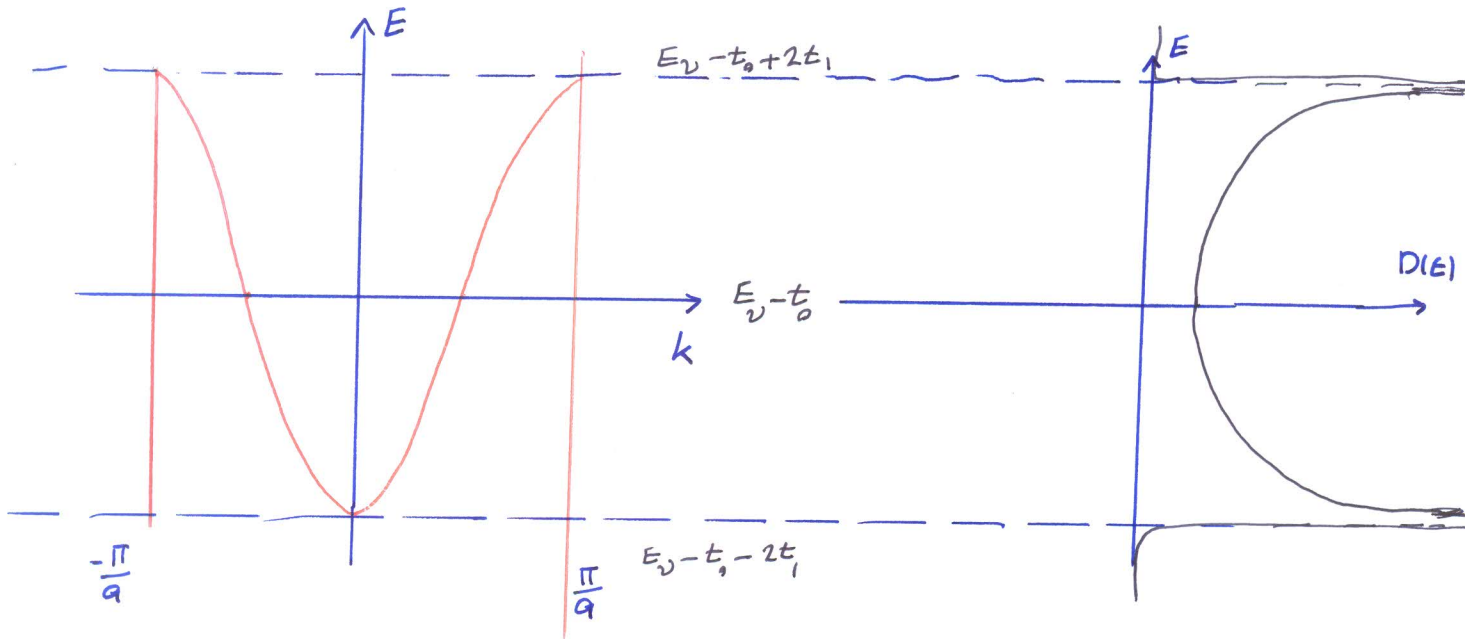
$$\frac{dk}{dE_k} = \frac{1}{2a |t_1| \sqrt{1 - \cos^2 ka}} = \frac{1}{2a |t_1| \sqrt{1 - \frac{(E - E_0 + t_0)^2}{4t_1^2}}}$$

$$D(E) = \frac{N_1 a}{2\pi} \frac{1}{2a |t_1| \sqrt{1 - \frac{(E - E_0 + t_0)^2}{4t_1^2}}}$$

$$D(E) = \frac{N_n}{2\pi} \frac{1}{2|t_1| \sqrt{1 - \frac{(\epsilon - E_v + t_0)^2}{4t_1^2}}} = \frac{N_n}{2\pi} \frac{1}{[4t_1^2 - (\epsilon - E_v + t_0)^2]^{\frac{1}{2}}}$$

دسته‌ی دوم مخرج در لبه‌های نوار و آنرا می‌شود.

van Hove singularities \rightarrow a signature of 1D system



توجه:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D(E) dE = N$$

چون اکثر اوقات N بسیار بزرگ است با انتخاب یک سلول واحد، Dos برآمده را می‌نویسیم

$$d(E) = \frac{D(E)}{N}$$

$$d(E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{[4t_1^2 - (\epsilon - E_v + t_0)^2]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(E) dE = 1$$