

# Metody symulacji w nanotechnologii – ćwiczenia

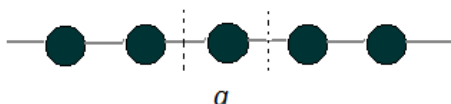
Ćwiczenia w laboratorium komputerowym. 6 godzin

## Praktyczne zastosowanie metody ciasnego wiązania do numerycznych obliczeń pasm energetycznych wybranych struktur grafenowych

### Ćwiczenie 1.

#### Jednowymiarowy łańcuch atomowy. Konstrukcja orbitala molekularnego i macierzy hamiltonianu.

Ćwiczenie jest rachunkowe. Zajmujemy się układem zbudowanym jak na poniższym rysunku:



Atomy reprezentowane są przez czarne punkty a wiązania przez łączące je kreski. Wielkość  $a$  – to stała sieci. Zakładamy jeden (1) orbital na każdym atomie, oznaczymy go  $\chi$  i choć może zależeć od 3 współrzędnych przestrzennych symbolicznie przypisujemy mu zależność tylko od  $x$  gdyż tylko w tym kierunku łańcuch jest periodyczny. Zakładamy skończoną liczbę węzłów w łańcuchu –  $N$ .  $\chi(x-na)$  to orbital atomowy centrowany na  $n$ -tym atomie w łańcuchu (licząc od początku łańcucha). Tworzymy orbital molekularny (krystaliczny) spełniający twierdzenie Blocha, jako

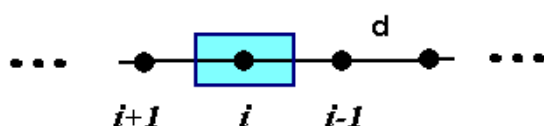
$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} \chi(x - na)$$

Energia, a właściwie wartość średnia energii w stanie opisywanym funkcją  $\phi$ , czyli tu element macierzy hamiltonianu  $H$ , będzie równa

$$E = \langle \phi | \mathbf{H} | \phi \rangle$$

Ponieważ każda  $\phi$  jest sumą wielu  $\chi$  zatem stosując przybliżenie najbliższych sąsiadów (patrz wykład), tzn. zakładając, że

rozszerzenie  $\langle \chi_i | \mathbf{H} | \chi_j \rangle$  są tylko dla  $j=i$  oraz  $j$  różniącym się od  $i$  o 1 (najbliższy sąsiad)



oraz kładąc  $\langle \chi_i | \mathbf{H} | \chi_i \rangle = 0$  (skalowanie energii) dostaniemy ostatecznie

$$E = \langle \chi_0 | \mathbf{H} | \chi_1 \rangle e^{ikd} + \langle \chi_0 | \mathbf{H} | \chi_{-1} \rangle e^{-ikd} = t2 \cos(kd) \quad (1)$$

tzn. jedno pasmo  $E(k)$ .

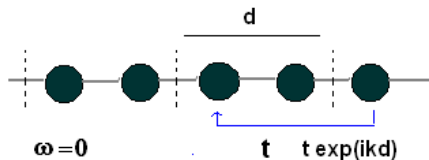
Należy wyprowadzić wzór (1), narysować go w dowolnym programie graficznym i zinterpretować.

### Ćwiczenie 2.

Łańcuch jednowymiarowy taki jak w ćwiczeniu 1, ale z komórką elementarną 2 razy większą (dwa atomy w komórce).

Cele ćwiczenia: (1) wyprowadzenie wzorów na elementy macierzy hamiltonianu, (2) zrozumienie, że powstaną dwa pasma energetycznie równoważne wynikowi ćwiczenia 1, (3) pokazać, że pasma energetyczne można uzyskać z rezultatów ćwiczenia 1 poprzez „złożenie” pasma do 2-krotnie mniejszej strefy Brillouina ( $d=2a$ ).

Tym razem mamy łańcuch jednowymiarowy z dwoma atomami w komórce elementarnej



Macierz hamiltonianu ma wymiar  $2 \times 2$  (bo dwa atomy w komórce elementarnej), zakładając, że elementy diagonalny kładziemy = 0, macierz  $H$  ma postać:

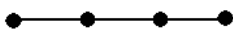
$$H = \begin{bmatrix} 0 & t(1 + e^{ikd}) \\ t(1 + e^{-ikd}) & 0 \end{bmatrix}$$

Widmo energii jest takie samo, choć teraz formalnie złożone z 2 pasm (bo dwie wartości własne  $H$ ). Ważne jest aby zauważyć różnicę w wielkości strefy Brillouina. Macierz można zdiagnozować „ręcznie” lub już na tym etapie napisać program, który będzie albo wczytywał macierz hamiltonianu, albo ją konstruował i wywoływał procedurę diagonalizacyjną.

### Ćwiczenie 3.

Konstrukcja macierzy  $H$  dla kilkuatomowej „molekuły” węgla.

Np. „molekuła”  $C_4$

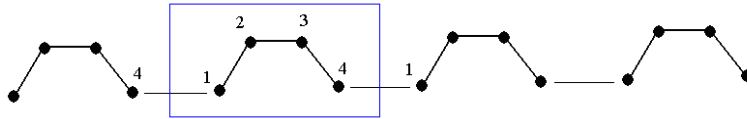


$H_{ii} = 0$ ,  $i=1,2,3,4$  - jako diagonalne elementy macierzy,  $H_{12} = H_{21} = H_{23} = H_{32} = H_{34} = H_{43} = t$  [ $t = -2.7$  eV] wszystkie pozostałe  $H_{kl} = 0$ ; tu  $H$  nie zależy od  $k$

### Ćwiczenie 4.

Konstrukcja macierzy  $H$  dla najprostszej wstęgi grafenowej typu fotelowego.

Należy najpierw ponumerować węzły w wybranej komórce elementarnej i w sąsiednich komórkach

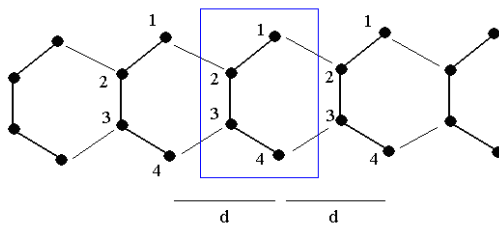


$$H = \begin{bmatrix} 0 & t & 0 & t(e^{-ikd}) \\ t & 0 & t & 0 \\ 0 & t & 0 & t \\ t(e^{ikd}) & 0 & t & 0 \end{bmatrix}$$

### Ćwiczenie 5.

Konstrukcja macierzy H dla najprostszej wstęgi grafenowej typu zygzak.

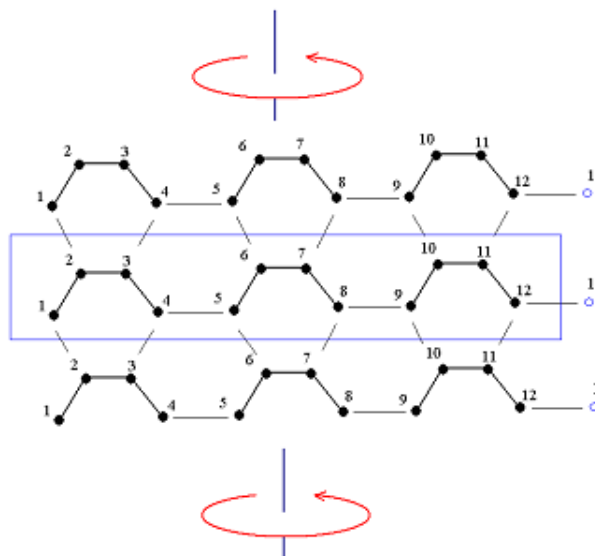
Należy najpierw ponumerować węzły w wybranej komórce elementarnej i w sąsiednich komórkach



$$H = \begin{bmatrix} 0 & t(1 + e^{ikd}) & 0 & 0 \\ t(1 + e^{-ikd}) & 0 & t & 0 \\ 0 & t & 0 & t(1 + e^{-ikd}) \\ 0 & 0 & t(1 + e^{ikd}) & 0 \end{bmatrix}$$

### Ćwiczenie 6.

Konstrukcja macierzy H dla nanorurki (3,3).



A macierz H (wymiar = 12):

$$\begin{bmatrix}
 0 & t(1+e^{ikd}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t \\
 t(1+e^{-ikd}) & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & t & 0 & t(1+e^{-ikd}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & t(1+e^{ikd}) & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & t & 0 & t(1+e^{ikd}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & t(1+e^{-ikd}) & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t(1+e^{-ikd}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t(1+e^{ikd}) & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & & & & \\
 & & & & & & & & & & & & \text{itd...}
 \end{bmatrix}$$

### Ćwiczenie zaliczeniowe.

Budowa, testowanie i uruchomienie programu komputerowego pozwalającego obliczać strukturę energetyczną dowolnych układów grafenowych, periodycznych i nieperiodycznych.

Ogólna struktura programu powinna być następująca

- Określenia liczby węzłów (atomów węgla) w komórce elementarnej,  $N = \dim H$ ,
- definicji wiązań wewnątrz komórki elementarnej (liczba elementów które  $H_{ij} = t$ ),
- definicji połączeń pomiędzy komórkami elementarnymi ( $t e^{ik}$ , lub  $t[1+e^{ik}]$ ),
- pętli po wartościach  $k$  (w strefie Brillouina),  
- diagonalizacji macierzy  $H$  dla każdego  $k$ , wybraną metodą, w zależności od wybranego języka programowania lub pakietu obliczeniowego,
- możliwości symulacji siły wiązania ( $t$ ) w różnych obszarach,
- możliwości modyfikacji komórki elementarnej poprzez dodawanie lub odejmowanie węzłów,
- zapisu danych do pliku;
- wykonanie wykresów pasm energetycznych (w ramach kodu) lub wykorzystując zewnętrzne narzędzia graficzne w oparciu o dane zapisane do pliku

Studenci mają prawo wybrać język programowania (Fortran, C, C++, Csharp, Matlab, Phyton, itd.)

Mogą korzystać z gotowych bibliotek zawierających procedury do diagonalizacji.

**Na zaliczenie konieczne jest wykazanie się znajomością kodu oraz uruchomienie programu dla wybranych struktur (np. nanorurka (6,6), nanorurka (5,0), nanowstęga grafenowa zygzak z jednym brzegiem modyfikowanym przez dodatnie tzw. węzłów Kleina).**