

# Kuliah Karbon Nanotube

Hasdeo

Tohoku University

# Purpose

- 1 Persiapan skripsi Theoretical Condensed Matter
- 2 Dosen pembimbing: Dosen UB + R. Saito (wacana)
- 3 Target: Simple tight binding + Fortran
- 4 Problem: Hanya 4 kali pertemuan
- 5 Requirement: Solid state + Quantum

# Contract

- ① 4 kali pertemuan
  - ① Intro
  - ② Basic Tight Binding Method
  - ③ Electronic structure of Graphene
  - ④ Electronic structure of SWNT
- ② Dokumentasi = Absen + tugas
- ③ Tugas: Analitik & Programming

# Outline

- 1 Quantum Mechanics
  - Particle in a 1D box
- 2 Crystalline Solid
  - Unit Cell
  - Teorema Bloch
  - Reciprocal Lattice
- 3 Tight Binding Method
  - Definition
  - Energy Eigenvalue
  - Dispersi Energi
- 4 Summary
- 5 Tugas

# Quantum Mechanics

- 1 Quantum: kuantisasi besaran fisika
- 2 Menjadi model terbaik untuk menjelaskan fenomena mikroskopik
- 3 Persamaan Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (1)$$

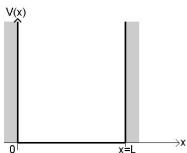
- 4  $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \rightarrow K$ ,
- 5  $\Psi \rightarrow$  natur gelombang sebuah partikel (de Broglie)
- 6 Hamiltonian  $\mathcal{H} = K + V$ , Pers. (1),

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi \quad (2)$$

- 7 Turunkan persamaan Schrodinger dari hukum kekekalan energi

## Particle in a 1D box

- ① 1D box untuk  $0 \leq x \leq L$ :  $V = 0$ ,  $\nabla \rightarrow d/dx$



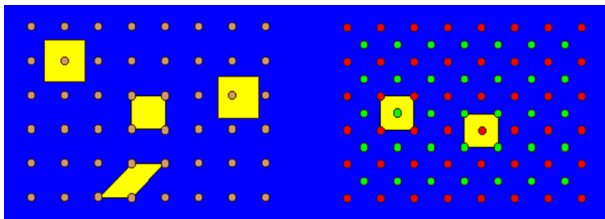
- ① Pers. Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = E\Psi \quad (3)$$

- ② Solusi  $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
- ③ Syarat batas  $\Psi(0) = 0$ ,  $A = -B$ ,  $\Psi(x) = A \sin(kx)$ ,  
 $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$
- ④ Syarat batas  $\Psi(L) = 0$ ,  $kL = n\pi$
- ⑤ Kuantisasi energi:

# Crystalline Solid

- Crystal: atom yang periodik
- Unit cell: unit periodisitas terkecil



- Solusi bergantung pada bentuk unit cell
- Makin tinggi tingkat simetri makin mudah diselesaikan

# Teorema Bloch

- Fungsi gelombang  $\Psi$  dalam kristal memenuhi teorema Bloch

$$\vec{T}_{\mathbf{a}_i} \Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \Psi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

$\vec{T}_{\mathbf{a}_i}$  adalah operasi translasi sepanjang vektor  $\mathbf{a}_i$ , dan  $\mathbf{k}$  wave vector

- Bentuk paling sederhana  $\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  plane wave

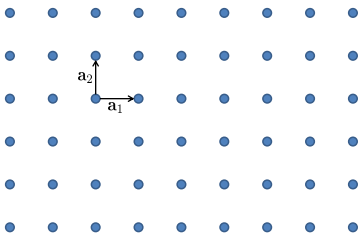


Figure : Unit vektor kisi  $\mathbf{a}_i$  pada kristal kotak 2D



# Reciprocal Lattice

- ① Ingat persamaan gelombang  $\Psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$
- ② Karena teorema Bloch

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{x}) &= \Psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \\ e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\end{aligned}\quad (6)$$

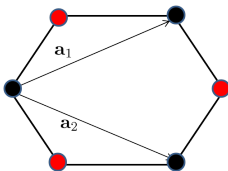
- ③ Vektor resiprok  $k$  memenuhi  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} = 1 \rightarrow k = 2\pi/a$  untuk 1D
- ④ Untuk 3D, misal vektor unit  $\mathbf{a} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ , maka reciprocal vector

$$\mathbf{k}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_i \cdot (\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k)}, \quad (i, j, k = 1..3) \text{ cyclic} \quad (7)$$

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{k}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (8)$$

## Reciprocal Lattice (2)

- 1 Tentukan reciprocal lattice vector untuk graphene unit cell



dengan  $|\mathbf{a}_1| = a$

## Definition

# Tight Binding (TB) Method

- Aproksimasi TB  $\rightarrow$  elektron-inti **kuat**, atom-atom **lemah**

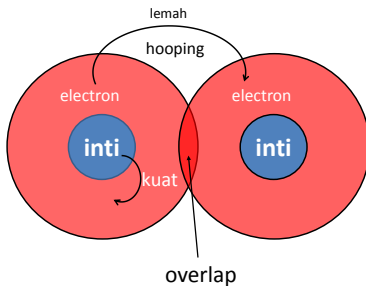


Figure : Ilustrasi aproksimasi TB

## Definition

## Tight Binding (TB) Method

- Fungsi gelombang  $\Psi$  dalam TB yang memenuhi Pers. (5)  $\rightarrow$  kombinasi linear orbital atom

$$\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(\mathbf{k}) \Phi_{j'}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (9)$$

- $\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  adalah fungsi gelombang untuk state ke  $j$  ( $j = 1 \dots n$ ),  $n$  adalah jumlah atomik orbital,  $C_{jj'}$  adalah koefisien yang akan dicari, dan  $\Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  adalah fungsi Bloch diberikan oleh

$$\Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (j = 1, \dots, n) \quad (10)$$

dengan  $\mathbf{R}$  adalah posisi atom pada kisi,  $\psi_j$  fungsi gelombang atomik orbital, dan  $N$  ( $\sim 10^{23}$ ) adalah jumlah unit cell.

Buktikan bahwa fungsi Bloch Pers. (10) memenuhi teorema Bloch Pers. (5)

$$\Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (11)$$

## Answer

$$\begin{aligned}\Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{a}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_j(\mathbf{r} + \mathbf{a} - \mathbf{R}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \sum_{\mathbf{R} - \mathbf{a}}^N e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{a})} \psi_j(\mathbf{r} + \mathbf{a} - \mathbf{R}) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})\end{aligned}$$

# Energy eigenvalue

Energy eigenvalue ke  $j$  dapat diselesaikan dengan persamaan

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{\langle \Psi_j | \mathcal{H} | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\int d\mathbf{r} \Psi_j^* \mathcal{H} \Psi_j}{\int d\mathbf{r} \Psi_j^* \Psi_j} \quad (12)$$

$\mathcal{H}$  adalah Hamiltonian zat padat. Dengan substitusi Pers. (10) ke Pers.(12) dan dengan sedikit mengganti indeks, kita dapatkan

$$E_i(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{j,j'}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | \mathcal{H} | \Phi_{j'} \rangle}{\sum_{j,j'}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle} = \frac{\sum_{j,j'}^n C_{ij}^* C_{ij'} H_{jj'}}{\sum_{j,j'}^n C_{ij}^* C_{ij'} S_{jj'}} \quad (13)$$

$H_{jj'} = \langle \Phi_j | \mathcal{H} | \Phi_{j'} \rangle$  adalah transfer integral dan  $S_{jj'} = \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle$  adalah overlap integral.

# Energy eigenvalue

Dengan melakukan optimasi Pers.(13) dengan mengambil  $\partial E_i(\mathbf{k}) / \partial C_{ij}^* = 0$ , kita mendapatkan persamaan sekular

$$\sum_{j'=1}^n \mathcal{H}_{jj'}(\mathbf{k}) C_{ij'} = E_i(\mathbf{k}) \sum_{j'=1}^n S_{jj'}(\mathbf{k}) C_{ij'} \quad (14)$$

Dalam representasi matriks dapat dituliskan sebagai

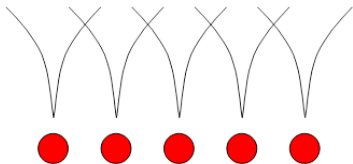
$$\det[\mathcal{H} - ES] = 0 \quad (15)$$



# Prosedur Mendapatkan Dispersi Energi

- 1 Tentukan
  - 1 unit cell dan unit vektor  $\mathbf{a}_i$ ,
  - 2 tentukan koordinat atom pada unit cell
  - 3 dan tentukan jumlah  $n$  orbital atom yang diperhitungkan
- 2 Carilah Brillouin zone dan reciprocal lattice vector  $\mathbf{b}_i$
- 3 Hitung  $\mathcal{H}_{ij}(\mathbf{k})$  dan  $S_{ij}(\mathbf{k})$
- 4 Selesaikan persamaan sekular, dapatkan  $E_i(\mathbf{k})$  dan  $C_{ij}(\mathbf{k})$ .

# Contoh Rantai Metal 1D



Diketahui:

- 1 satu atom per unit cell,  $\mathbf{a}_i = a\hat{\mathbf{x}}$ , jumlah orbital = 1

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{ikla} \psi(x-la) \quad (16)$$

- 2 Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)$$

# Contoh Rantai Metal 1D

- Dispersi energi

$$E_k(\mathbf{k}) = \frac{\langle \Psi_k | \mathcal{H} | \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle} \quad (17)$$

$$= \frac{\frac{1}{N} \sum_{l,m=1}^N e^{ik(m-l)a} \int dx \psi^*(x-la) \mathcal{H} \psi(x-ma)}{\frac{1}{N} \sum_{l,m=1}^N e^{ik(m-l)a} \int dx \psi^*(x-la) \psi(x-ma)} \quad (18)$$

$$= \frac{\sum_{l,m=1}^N e^{ik(m-l)a} \mathcal{H}_{lm}}{\sum_{l,m=1}^N e^{ik(m-l)a} S_{lm}} \quad (19)$$

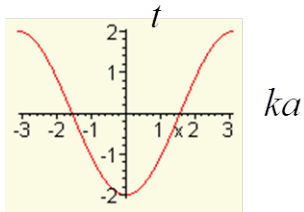
# Contoh Rantai Metal 1D

- Aproksimasi 1 tetangga terdekat,

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{H_0 + e^{ika} H_1 + e^{-ika} H_1}{S_0}$$

$$E_j(\mathbf{k}) = \varepsilon - t \cos(ka)$$

$$\frac{E_k - \varepsilon}{t}$$



- Kerjakan soal yang sama untuk bila atom A dan B saling bergantian dengan transfer integral  $t_1$  dan  $t_2$ .

# Summary

- 1 Quantum mechanics → solusi mikroskopik terbaik
- 2 Pers. Schrodinger → sulit untuk diselesaikan untuk atom dalam jumlah banyak
- 3 Dengan periodisitas kristal → masalah jadi sederhana (teorema Bloch)
- 4 Tight binding approximation → state didefinisikan
- 5 Dispersi energi → secular equation + aproksimasi tetangga terdekat

## Additional Task

- 1 Install linux <http://www.ubuntu.com/download/desktop>
- 2 Install fortran composer XE 2013 linux  
<http://software.intel.com/en-us/non-commercial-software-development>
- 3 Download PPT [flex.phys.tohoku.ac.jp/~hasdeo](http://flex.phys.tohoku.ac.jp/~hasdeo)