

1. Суперпозиция решетки 1D кристалла по методу Якоби

- Рассмотрим N -ю квантовую яму в 1D кристалле

$$\hat{H} = \hat{T} + \sum_n V_n \quad / \quad V_n - \text{потенциальная } n\text{-тая квантовая яма}$$

$$(\hat{T} + V_n)\phi_n = E\phi_n \quad / \quad \phi_n - \text{орбитальная (волновая функция) привязанная к } n\text{-той квантовой яме}$$

$$\phi_n = \phi(x - x_n) \quad (\text{одинаковые квантовые ямы, только смещение})$$

$$\psi = \sum_n c_n \phi_n \quad / \quad \psi - \text{волновая функция электрона в 1D кристалле}$$

- Теперь решаем собственные значения

$$\#1 \quad Hc = Ec \quad / \quad H \text{ и } S - \text{матрицы бесконечные}$$

- Используем Блоховскую теорему

$$\psi_k = \sum_n c_n^{(k)} \phi_n \quad ; \quad c_n^{(k)} = e^{ikx_n} = e^{ikna}$$

- Рассмотрим решетку $\#1$

$$\#2 \quad \left[\sum_n H_{mn} e^{ikna} = E(k) \sum_n S_{mn} e^{ikna} \right] ; \quad H_m$$

$$H_{mn} = \int \phi_m^* (\hat{T} + V_n + \sum_{l \neq n} V_l) \phi_n dx = E S_{mn} + \sum_{l \neq n} V_{ml}^{(l)}$$

$\rightarrow$ по аппроксимации ближайших соседей (~~только~~
($V_{mn}^{(l)} \approx 0$ если l не ближайший сосед))

$$H_{mm} = E S_{mm} + V_{mm}^{(m-1)} + V_{mm}^{(m+1)} = E - 2C \quad / \quad \text{дифференциальные элементы Гамильтониана}$$

$$-C = V_{mm}^{(m \pm 1)} \quad / \quad \text{энергия кристалла}$$

$$\Rightarrow H_{m, m \pm 1} \neq 0 \Rightarrow H_{m, m \pm 1} = E S_{m, m \pm 1} + V_{m, m \pm 1}^{(m)} = \cancel{E S_{m, m \pm 1}} - t$$

$$S = S_{m, m \pm 1}$$

$$-t = V_{m, m \pm 1}^{(m)}$$

#2 слагаються

$$\sum_n H_{mn} e^{tkna} \approx (H_{mm} + H_{m,m+1} e^{tka} + H_{m,m-1} e^{-tka}) e^{tkma}$$

$$\approx [E - 2c + 2(Es - t) \cos ka] e^{tkma}$$

#2 з обох сторін можна записати:

$$\sum_n S_{mn} e^{tkna} \approx (1 + 2s \cos ka) e^{tkma}$$

$$E(k) = \frac{\sum_n H_{mn} e^{tkna}}{\sum_n S_{mn} e^{tkna}} = \frac{E - 2c + 2(Es - t) \cos ka}{1 + 2s \cos ka}$$

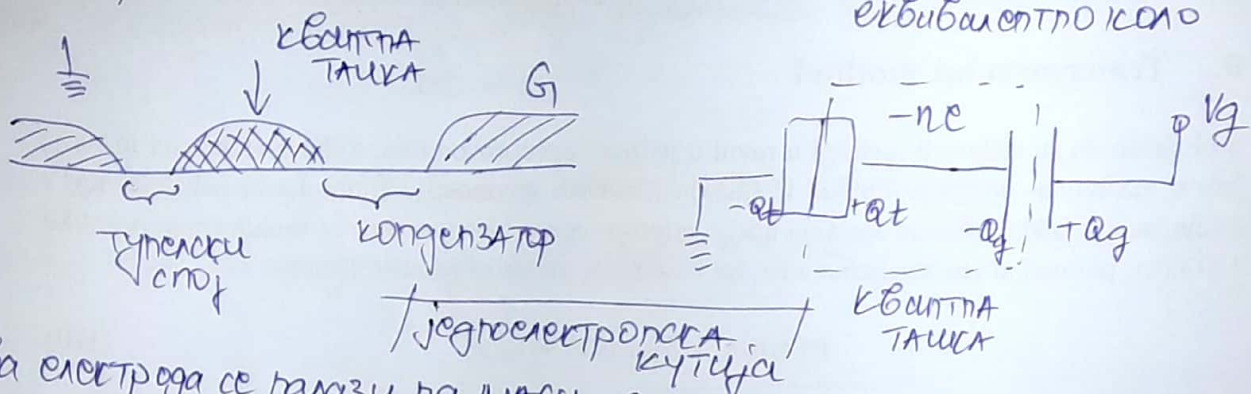
Ако або мало розвинути

$$E(k) = \frac{E(1 + 2s) \cos ka - 2c - 2t \cos ka}{1 + 2s \cos ka}$$

$$= E - 2 \frac{c + t \cos ka}{1 + 2s \cos ka}$$

$$E(k) \approx E - 2t \cos ka \quad \text{у випадку збереж 4t.}$$

2] Користити симболе тунелског ~~спрјат~~ и кондензатора, предложити симболе једноелектронске кутије и једноелектронског транзистора.



Лева електрода се налази на маси, а десна електрода представља електроду врата. Врат контролише транспорт носилаца кроз квантну тачку. Електрон може да тунелује само кроз тунелски спој између масе и квантне тачке. $V_g \uparrow \Rightarrow$ долази до акумулације наелектрисања у квантној тачки. Електрони који су ушли у квантну тачку делују одбојном силом на следећи електрон који жели кроз тунелски спој. Трансфер електрона у квантну тачку није могућ, све док V_g не буде довољно велики (Колумбова блокада).

Нека је број електрона у квантној тачки n ; одатле је наелектрисање квантне тачке $-ne$. Да би постојала Колумбова блокада

$$E_C \gg k_B T, \quad E_C \Rightarrow \text{енергија наелектрисавања квантне тачке додатним електроном}$$

$$\text{односно } \frac{e^2}{C} \gg k_B T, \quad C \Rightarrow \text{самокатапитивност квантне тачке}$$

T , температура система

Такође, да би Колумбова блокада постојала мора да важи и

$$R_T \gg \frac{h}{e^2} \quad \text{ако је услов да су занемариве флукуације у броју електрона у квантној тачки}$$

* За једноелектронску праву извести услов под којим су занемариве квантне флукуације у броју електрона у квантној тачки.

Изводе на основу релације неопређености:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Нека је неодређеност енергије наелектрисања квантне тачке релативно
 вредности енергије наелектрисавања:

$$\Delta E \sim \frac{e^2}{C}$$

Време наелектрисавања је релативно временске константе τ_f :

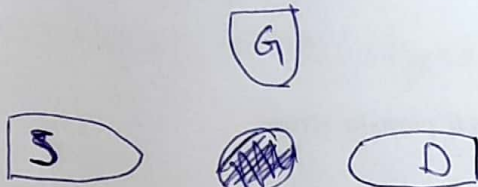
$$\Delta t = R_t \cdot C$$

$$\Rightarrow \Delta E \cdot \Delta t \sim \frac{e^2}{C} \cdot R_t C = e^2 R_t \geq \hbar \Rightarrow R_t \geq \frac{\hbar}{e^2}$$

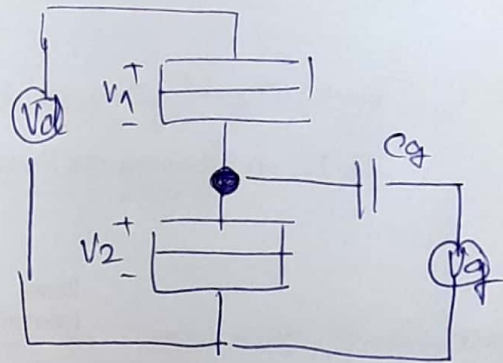
Да би ова флукуација била много мања од E_c , мора да важи

$$R_t \gg \frac{\hbar}{e^2}$$

* једноелектронски транзистор



Квантна тачка налази се између два тунелска споја уз сорс и дрејн и кондензатора уз গেјт

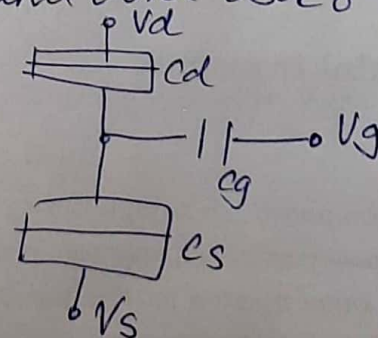


Еквивалентно коло једноелектронског транзистора

Контакт গেјта је капацитивно спречит са острвци $\Rightarrow$ реализован је једноелектронски транзистор.

Напон গেјта омогућава да се мења наелектрисање острва $\frac{n}{e}$ да се помера област Колумбове блокаде. Стабилна област Колумбове блокаде се може постићи за $n \neq 0$.

или боље овоко



Извести израз за апроксимативну дисперзиону релацију електрона у проводној зони графена у околини K тачке у брцуленом зони. $a_x = \frac{\sqrt{3}a}{2}$; $a_y = \frac{a}{2}$ | поштом од питања [4], па тек онда радим [3].

Дисперзиона релација има форму

$$E(k_x, k_y) = \pm \hbar v_F \sqrt{1 + 4 \cos k_y a_y \cos k_x a_x + 4 \cos^2 k_y a_y}$$

У околини K тачке: $\vec{k} = (k_x, k_y) = (0, \pm \frac{4\pi}{3a})$ поштује је ово под кореном да се развије у Тејлоров ред до првог степена.

$$\cos(k_x a_x) \approx 1 - \frac{\delta k_x^2 a_x^2}{2}$$

$$\begin{aligned} \cos(k_y a_y) &= \cos((k_y + \delta k_y) a_y) \approx \cos(k_y a_y) - \sin(k_y a_y) \delta k_y a_y \\ &= -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \delta k_y a_y \end{aligned}$$

где је $\delta k_x = k_x$; $\delta k_y = k_y - \frac{4\pi}{3a}$

Заменом ових апроксимативних израза за косинусе, добијамо

$$\Rightarrow 1 + 4 \cos k_y a_y (\cos k_x a_x + \cos k_y a_y) \approx 1 + 4 \left(-\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \delta k_y a_y \right) \cdot$$

$$\cdot \left(1 - \frac{\delta k_x^2 a_x^2}{2} - \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \delta k_y a_y \right)$$

Задржавајући се само на квадратним члановима за δk_x и δk_y :

$$1 + 4 \cos k_y a_y (\cos k_x a_x + \cos k_y a_y) \approx 1 - (1 - \delta k_x^2 a_x^2 - 3 \delta k_y^2 a_y^2)$$

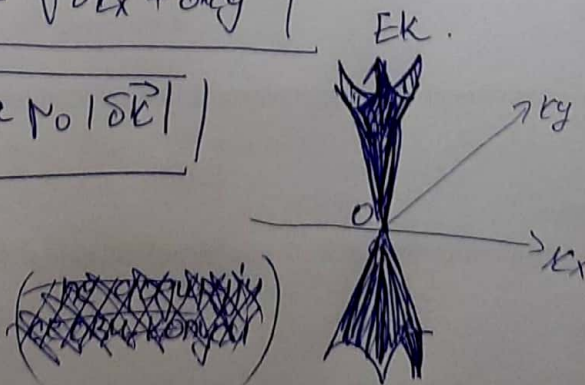
$$= \frac{9 a_x^2}{4} \delta k_x^2 + 3 \frac{3 a_y^2}{4} \delta k_y^2$$

$\Rightarrow$ Коначно, апроксимативне дисперзионе релације су:

$$E(\vec{k}) = \pm \frac{3 \hbar v_F a}{2} \sqrt{\delta k_x^2 + \delta k_y^2}$$

односно

$$E(\vec{k}) = \pm \frac{\sqrt{3} a}{2} \hbar v_F |\delta \vec{k}|$$



[4] Извести израз за дисперзиону релацију електрона у проводној зони графена попутно метода јаке везе.

$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = C_A(\vec{k}) \phi_A(\vec{k}, \vec{r}) + C_B(\vec{k}) \phi_B(\vec{k}, \vec{r})$ | Таласна ф-ја
 $C_A, C_B \Rightarrow$ коефицијенти експанзије у таласне ф-је јаке везе атома
 врсте А и В

$$\phi_A(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_i)$$

$$\phi_B(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_B(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_i)$$

} ф-је јаке везе
 $N \Rightarrow$ број атома
 једне врсте у
 кристалу

Претпоставити да построји преслањање само
 између најближих суседа. Тада је:

$$[H_{AA}] = \langle \phi_A(\vec{k}, \vec{r}) | \hat{H} | \phi_B(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_i = \vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_i)} \langle \psi_A(\vec{r} - \vec{R}_i) | \hat{H} | \psi_A(\vec{r} - \vec{R}_i) \rangle$$

$$= E_F \langle \psi_A(\vec{r}) | \psi_A(\vec{r}) \rangle = [E_F]$$

где је E_F енергија електрона на 2pz орбитали.

исто је $[H_{BB} = E_F]$. Јако:

$$H_{AB} = \langle \phi_A(\vec{k}, \vec{r}) | \hat{H} | \phi_B(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}_j \neq \vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \langle \psi_A(\vec{r} - \vec{R}_i) | \hat{H} | \psi_B(\vec{r} - \vec{R}_j) \rangle$$

$$\text{обде је } \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}_j \neq \vec{R}_i} \dots = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_i} \sum_{\vec{R}_0} = \sum_{i=1}^3 \dots$$

($\sum_{\vec{R}_0} = N$ јер су сви атоми врсте А еквивалентни).

$$\Rightarrow H_{AB} = \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{0i}} \langle \psi_A(\vec{r}) | \hat{H} | \psi_B(\vec{r} - \vec{R}_{0i}) \rangle$$

или у групулациој форми:

$$H_{AB} = t (e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{01}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{02}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{03}}) = t f(\vec{k})$$

$$f(\vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \frac{a}{\sqrt{3}}} + 2e^{-\frac{i\vec{k} \cdot a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{\vec{k} \cdot a}{2}\right)$$

Трансфер матрица је хермитова $\Rightarrow H_{AB} = H_{BA}^*$
 $\Rightarrow \hat{H} \Rightarrow 1$ и узимајући у обзир само преклапања између стања еквивалентних атома на истим местима и суседних нееквивалентних атома на различитим местима, долазимо до:

$$S_{AA} = S_{BB} = 1$$

$$S_{AB} = S(f\vec{k}) = S_{BA}^*$$

Трансфер матрица: $H = \begin{bmatrix} E_p & t f(\vec{k}) \\ t f(\vec{k})^* & E_p \end{bmatrix}$

Матрица преклапања:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & s f(\vec{k}) \\ s f(\vec{k})^* & 1 \end{bmatrix}$$

Секуларна јна: $\det(H - ES) = 0$

$$\Rightarrow (E_p - E)^2 - (t - Es)^2 |f(\vec{k})|^2 = 0$$

Ако је $|f(\vec{k})| = w(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3} k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}$

$$\rightarrow (1 - s^2 w^2) E^2 + 2(t s w^2 - 2 E_p) E + (E_p^2 - t^2 w^2) = 0$$

Решавање секуларне јне је:

$$E_{\pm} = \frac{E_p \pm t w(\vec{k})}{1 \pm s w(\vec{k})}$$

Дисперзионе релације за Γ и Γ^* зоне ако је $s = 0$ су:

$$E_{\pm}(k_x, k_y) = \pm \hbar \omega_0 \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3} k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}$$

$$\hbar \omega_0 = -t$$

Најпоштом коришћен израз за дисперзионе релације Γ зона у нају брзину

5 Одредити Фермијеву енергију у графену E_F

- $E_F \Rightarrow$ вредност енергије највишег заузетог стања у датом материјалу на $T = 0K$.

- Одредити се на основу разматрања попуњавања стања π електрона у Брилеуовој зони графена, поштујући Паулијев принцип искључења

- Нека у узорку графена постоји N примитивних ћелија. Примитивна ћелија графена има облик ромба и садржи по једно атом брсте А и В.

- Сваки атом угљеника у графену даје једно стање (p_z орбиталу) број стања у графену је $2N$. Свако стање је спински дегенератно, укупан број стања је $4N$. Знано да су стања потекла од p_z орбитала ортогонална у 2π зоне $\Rightarrow$ број стања у свакој зони је $2N$.

- Такође, сваки атом угљеника даје графену један електрон на p_z орбитали. Укупан број атома је $2N$, па је укупан број електрона $2N$. Ово значи да су сва стања у валентној (π) зони попуњена. Како је највиша вредност енергије електрона у π зони у K тачки, онда је и највиша вредност енергије заузетог стања исто у овој тачки.

- Значи смо узвратили да је вредност енергије у овој тачки једнака нули односно $E_F = E_p = 0$ тј. Фермијев ниво пролази кроз K тачку.

[6] Извести израз за густину електронских стања у графену у околини k -тачке. Познато је v_F . (или у проводној зони)

• Број стања у интервалу енергија $[E, E+dE]$ је:

$$dN = 2g_z \frac{dS_{\vec{k}}}{(2\pi)^2}$$

$dS_{\vec{k}} \Rightarrow$ елементарна површина у $\vec{k}$ простору

$\frac{(2\pi)^2}{S} \Rightarrow$ површина коју заузима једно стање

$g_z \Rightarrow$ димензиона дегенерација; за графен $g_z=2$ јер постоје 2 нееквивалентне тачке у бринуловој зони

Еквивалентне површи у графену су кружови у околини k -тачке.

$$dS_{\vec{k}} = 2\pi k dk \Rightarrow dN = 4 \frac{2\pi k dk}{(2\pi)^2} = S \frac{2}{\pi} k dk$$

Густина стања је: $D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2}{\pi} S k \frac{dk}{dE}$

Ако користимо дисперзиону релацију електрона у проводној зони графена:

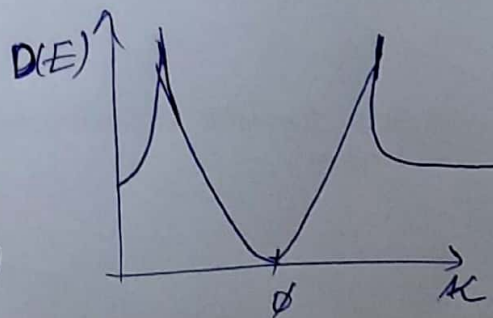
$$E = \hbar v_F \cdot k \Rightarrow \frac{dE}{dk} = \hbar v_F$$

$$\Rightarrow D(E) = S \frac{2}{\pi} \frac{k}{\hbar v_F} \quad \text{и} \quad k = \frac{E}{\hbar v_F}$$

$$\Rightarrow \boxed{D(E) = S \frac{2}{\pi} \frac{E}{(\hbar v_F)^2}} \quad \text{густина стања}$$

* густина стања по јединици површине

$$g(E) = \frac{D(E)}{S} = \frac{2}{\pi} \frac{|E|}{(\hbar v_F)^2} = \frac{2}{\pi} |E|$$



апроксимативни израз за густину стања у околини $E=0$.
Ако је E велике, дисперзиона релација није линеарна и
дивергира за $E=\hbar v_0$.

[7] Који је вишезонски k -р Хамилтонијан пример за опис стања

(a) у валентној зони напоструктура формирана од материјала велике

Ег и велике енергије мењања у односу на слободне интеракције?

(б) Који је ред матрице која представља Хамилтонијан?

(у) Две предности метода јаче везе у односу на вишезонски k -р модел.

(а) Двонзонски (Латингер-Конов) модел; ред Хамилтонијала 4.

једнозонски модел $\Rightarrow$ проводна зона, широкозонски полупроводник

-||- са енергијом зависном ефективном масом $\Rightarrow$ ускозонски полупроводник

тразонски (L-K) модел $\Rightarrow$ матрица ред 6

Ег велико, а Δ ред велике или мање од откопа енергија од интереса у валентној зони.

(у) омогућава рачунање зонске структуре у целој Брилујевој зони
могу се разматрати интратантни слојеви

NANOELEKTRONSKE NAPRAVE

(ispit)

ETF, Beograd, 27.8.2022.

1. (15) Objasniti postupak numeričkog izračunavanja diskretnih stanja u 1D kvantnoj jami pomoću metoda gađanja.
2. (15) Izvesti Landauerovu formulu.
3. (20) Gustina struje rezonantne tunelske diode na niskoj temperaturi T i visokom naponu polarizacije V data je relacijom:

$$J = \frac{e}{h} \frac{m}{\pi \hbar} \int_{U_L}^{\mu_L} (\mu_L - E_z) T(E_z) dE_z, \quad E_z = E - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}.$$

Pretpostaviti da postoji jedan rezonantni nivo E_{pk} . Zavisnost koeficijenta transmisije od E_z data je Breit-Wigner-ovom relacijom:

$$T(E_z) = \frac{T_{pk}}{1 + \left(\frac{E_z - E_{pk}}{\Gamma/2} \right)^2}.$$

- (a) Odrediti i skicirati strujno naponsku karakteristiku, ako važe sledeće pretpostavke: $E_{pk}(V) = E_{pk}(0) - eV/2$, $\mu_L - E_z \approx \mu_L - E_{pk}$. (b) Odrediti maksimalnu vrednost gustine struje.

-
4. (15) Izvesti izraz za zavisnost gustine elektronskih stanja od energije u provodnoj zoni grafena u okolini K tačke i skicirati ovu zavisnost.
 5. (15) Izvesti uslove pod kojima su cik-cak i foteljaste nanotube: (1) poluprovodne, (2) metalne.
 6. (20) Polazeći od sekularne jednačine Kane-ovog modela:

$$E' [E' (E' - E_g) (E' + \Delta) - k^2 P^2 (E' + 2\Delta/3)] = 0,$$

gde su svojstvene vrednosti energije E' (koreni sekularne jednačine) slabo zavisne od k^2 :

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = C + \varepsilon(k^2), \quad C = \{E_g, 0, 0, -\Delta\}, \varepsilon \ll \Delta, \varepsilon \ll E_g,$$

izvesti disperzione relacije zona ovog modela i odrediti efektivne mase elektrona i šupljina u zonama. Objasniti koja zona nije na adekvatan način opisana Kane-ovim modelom. *Zona šupljina*

Napomene. Studenti koji rade prvi kolokvijum rade pitanja/zadatke 1-3 u vremenu od maksimalno 120 minuta. Studenti koji rade drugi kolokvijum rade pitanja/zadatke 4-6 u vremenu od maksimalno 120 minuta. Studenti koji polažu integralni ispit rade svih šest pitanja/zadataka za maksimalno 180 minuta.