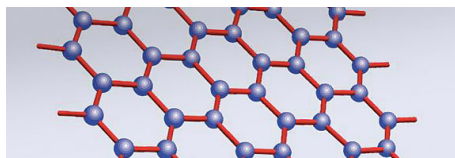
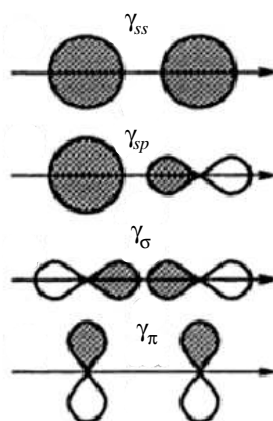


2. DOMAČA NALOGA IZ FIZIKE TRDNE SNOVI
8. januar 2009 (rok oddaje: 16. februar 2009)

Grafen je dvodimenzionalen kristal ogljika, v katerem atomi ogljika tvorijo t.i. satovje. Razdalja med sosednjimi atomi ogljika je 1.4 Å.



Elektronske pasove pri energijah v bližini Fermijeve energije lahko uspešno opišemo v približku tesne vezi. Pri tem upoštevamo po štiri atomske orbitale ($2s$, $2p_x$, $2p_y$ in $2p_z$) v vsakem od ogljikovih atomov. Koordinatni sistem postavimo tako, da je os z pravokotna na ravnino kristala. Izhodišče energijske skale izberemo pri (zaradi potenciala ostalih atomov v kristalu premaknjeni) energiji atomskih orbital $2p$ ($\epsilon_{2p} + \beta_{2p} = 0$). Premaknjena energija atomske orbitale $2s$ je tako $\epsilon_{2s} + \beta_{2s} = -8.9$ eV. Prekrivalni integrali med orbitalami na sosednjih atomih (glej sliko) so $\gamma_{ss} = 6.8$ eV, $\gamma_{sp} = 5.6$ eV, $\gamma_{\sigma} = 5.0$ eV in $\gamma_{\pi} = 3.0$ eV.



1. Pokaži, da je matrika, ki v približku tesne vezi določa energije pasov, bločna: v enem od blokov nastopata samo orbitali $2p_z$, v drugem pa vse ostale orbitale.
2. Izračunaj disperzijo energijskih pasov, ki jih tvorijo orbitale $2p_z$!
3. Analitično obravnavaj gostoto stanj v teh pasovih v bližini energij 0, γ_{π} in na zgornjem robu zgornjega pasu.
4. Zapiši matriko, ki v približku tesne vezi določa energije pasov, nastalih iz atomskih orbital $2s$, $2p_x$ in $2p_y$. Matrične elemente izrazi z energijami orbital $\epsilon_{2s} + \beta_{2s}$ in $\epsilon_{2p} + \beta_{2p}$ ter s prekrivalnimi integrali γ med orbitalami na sosednjih atomih, ki si prikazani na sliki zgoraj. Vrednosti prekrivalnih integralov γ , ki na sliki niso prikazani, izračunaj sam.
5. Nariši disperzijo vseh energijskih pasov vzdolž krivulje Γ -M-K- Γ v prvi Brillouinovi coni. Točka Γ je središče prve Brillouinove cone, točka M središče stranice lika, ki omejuje prvo Brillouinovo cono, točka K pa oglišče tega lika. Matriko diagonaliziraj numerično!