Προαιρετικό project για το Graphene

Υποδείξεις

1. Με κανόνα και διαβήτη σχεδιάστε ίσους αλληλοτεμνόμενους κύκλους των οποίων η κοινή χορδή ισούται με την ακτίνα. Όλες αυτές οι χορδές αποτελούν το πλέγμα της κυρήθρας. Τα βασικά διανύσματα είναι τα

$\mathbf{a}_1 \qquad \mathbf{a}_2 \qquad \text{Βλ..Σχ. } 7.8\alpha \qquad (\mathbf{a}_3 = -(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2))$

$\phi_j \equiv \mathrm{k} \cdot \mathbf{a}_j, \quad j = 1,\ 2,\ 3.$

Στη συνέχεια βρισκουμε τα δεσμικα και αντιδεσμικά τροχιακα

$$\varepsilon_b = \varepsilon_{sp^2} - |V_2| = \frac{1}{3}(\varepsilon_s + 2\varepsilon_p) - 3,26\frac{\mathrm{h}^2}{m_e d^2} = -13,8367 - 12,3061 =$$

$$= -26,14\,\mathrm{eV}$$

$$\varepsilon_a = -1,53\,\mathrm{eV}$$

Εν συνεχεια από τις σχεσεις (7.51-7.55) βρισκουμε τις ιδιοενεργειες και τα τροχιακά για τα p_z.

Για τα τρια δεσμικα μοριακά τροχιακα πρεπει να διαγωνοποιησουμε την ακολουθη 3x3 μητρα για να βρουμε τις ιδιοενεργειες και τα τροχιακά του στερεου. Παρομοια διαδικασια για τα τρια αντιδεσμικά τροχιακά (Βλ. το βιβλιο E. N. Economou, The Physics of Solids, Springer 2010, σελ. 385). *Δικαιολογήστε τους παρακάτω τύπους.*

$$H_{11} = \varepsilon_b + 2V_2'(\cos\phi_1 + \cos\phi_2) = -26,14 + 0,656(\cos\phi_1 + \cos\phi_2)$$
$$H_{12} = V_b(1 + e^{-i\phi_2}) + V_2(e^{i\phi_1} + e^{i\phi_3})$$
$$H_{13} = V_b(1 + e^{i\phi_1}) + V_2(e^{-i\phi_2} + e^{-i\phi_3})$$

$$H_{21} = V_b(1 + e^{i\phi_2}) + V_2(e^{-i\phi_1} + e^{-i\phi_3})$$
$$H_{22} = \varepsilon_b + 2V_2'(\cos\phi_2 + \cos\phi_3)$$
$$H_{23} = V_b(1 + e^{-i\phi_3}) + V_2(e^{i\phi_2} + e^{i\phi_1})$$

$$H_{31} = V_b(1 + e^{-i\phi_1}) + V_2(e^{i\phi_2} + e^{i\phi_3})$$
$$H_{32} = V_b(1 + e^{i\phi_3}) + V_2(e^{-i\phi_2} + e^{-i\phi_1})$$
$$H_{33} = \varepsilon_b + 2V_2'(\cos\phi_3 + \cos\phi_1)$$

$\overset{\iota}{\mathbf{H}}\,\overset{t}{\mathbf{c}} = E\,\overset{t}{\mathbf{c}}$ για τους τρεις bonding κλάδους, όπου $\overset{\iota}{\mathbf{H}}$ είναι ένας 3x3 πίνακας με στοιχεία που δίνονται πιο πάνω και ο $\overset{\iota}{\mathbf{c}}$ είναι ένας 1x3 πίνακας στήλης.

Για τους τρεις antibonding κλάδους ισχύουν παρόμοιες σχέσεις με το ε_b να αντικατασταθεί από το ε_a και τα τρία V να αντικατασταθούν από τα αντίστοιχα $\bar{V}$

Τελος πρεπει να κατασκευασθει η 1η ΖΒ κατά τα γνωστα και να σχεδιαστουν και οι 8 κλαδοι (2+3+3) ως συναρτησεις του k κατά μηκος των γραμμων ΓΡQΓ σε ενα ενιαιο σχημα. Βλέπε και συγκρινε με το Σχ. 4.6. σελ. 146 του βιβλίου Atomic and Electronic Structure of Solids by E. Kaxiras, Cambridge Un. Press, 2003.