Fizika trdne snovi

Barbara Horvat

19.02.2005

2. domača naloga iz Fizike trdne snovi

1 Enoverižna DNA

Obravnavati sem morala prevodni pas verige predstavljene na Slika1 v približku tesne vezi. Podano pa je bilo:

$c = \frac{1}{2}a = 0,34nm$ (Slika1)
preskakovalni integral: $|t| = 0,2eV$
energija najnižje nezasedene molekulske orbitale:
-A $\epsilon_{S_1} = 2,52eV$
-B $\epsilon_{S_2} = 2,76eV$.

1.1 Disperzija elektronske energije ter širina pasov

1.1.1 Baza

Pri opisu mreže moramo povedati kakšna je baza oz. vektorji, s katerimi povemo povezavo med gradniki v enoti Bravaisove mreže. V našem primeru je baza kar (Slika1):

$$\vec{r}_0 = 0 \quad Adenin$$

$$\vec{r}_1 = c(1,0,0) = \vec{b} \quad Gvanin.$$

1.1.2 Primitivni vektorji

Tudi primitivne vektorje lahko preberemo iz Slika1:

$$\vec{a}_1 = a(1,0,0)$$

$$\vec{a}_2 = d_2(0,1,0)$$

$$\vec{a}_3 = d_3(0,0,1).$$

1.1.3 Vektor Bravaisove mreže

Vektor Bravaisove mreže zapišemo kot linearno kombinacijo primitivnih vektorjev in upoštevamo $m_2 = \ m_3 = 0$ ($1D$ primer):

$$\vec{R} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3 = m_1 a(1,0,0).$$

1.1.4 Izračun disperzije elektronske energije

Nastavek za valovno funkcijo elektronov za dva gradnika v bazi:

$$\Psi = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}[B_1\Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) + B_2\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})].$$

S tem nastavkom rešujemo Schrödingerjevo enačbo:

$$H\Psi = \epsilon(\vec{k})\Psi$$

katero pomnožimo z leve z in nato še integriramo po:

1. $/\Phi_A^*(\vec{r}) \quad / \int d\vec{r}$

$$\begin{aligned} & B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})H\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})H\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})d\vec{r} \quad = \\ = & B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})\epsilon(\vec{k})\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})\epsilon(\vec{k})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})d\vec{r} \quad = \\ = & B_1\epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2\epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})d\vec{r}. \end{aligned}$$

Velja še:
$\epsilon_{S_1} = \int \Phi_A^*(\vec{r})H\Phi_A(\vec{r})d\vec{r}$ ($\vec{R}=0$, sedimo na adeninu; smo znotraj osnovne celice)
$t = \int \Phi_A^*(\vec{r})H\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r}$ (le ko seštevamo po najbližjih sosedih, smo med celicama).

Tako lahko zapišemo:

$$B_1\epsilon_{S_1} + B_2\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}t(\vec{b}) = B_1\epsilon(\vec{k})\int \Phi_A^*(\vec{r})\Phi_A(\vec{r})d\vec{r} + B_2\epsilon(\vec{k})\int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r}.$$

V prvem členu na levi in na desni strani enačbe smo izgubili vsoto, ker smo rekli, da ima prekrivalni integral neničelno vrednost le takrat, ko $\vec{R}=0$. V drugih dveh členih pa seštevamo le po najbližjih sosedih oz. $\vec{R}+\vec{b}=\vec{b}$.

Upoštevamo še:
$\int \Phi_A^*(\vec{r})\Phi_A(\vec{r})d\vec{r} = 1$
$\int \Phi_A^*(\vec{r})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r} = 0$ (adeninov elektron ima velik vpliv na adeninu, majhen na gvaninu)

ter dobimo izraz:

$$B_1\epsilon_{S_1} + B_2 t(\vec{b})\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \quad = \quad B_1\epsilon(\vec{k}).$$

2. $/\Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b}) \quad / \int d\vec{r}$

$$B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})H\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})H\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})d\vec{r} \quad =$$

$$= B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})\epsilon(\vec{k})\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})\epsilon(\vec{k})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})d\vec{r} \quad =$$

$$= B_1\epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2\epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})d\vec{r}.$$

Velja še:
$\epsilon_{S_2} = \int \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})H\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r}$ ($\vec{R}=0$, sedimo na gvaninu; smo znotraj osnovne celice)
$t^* = \int \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})H\Phi_A(\vec{r})d\vec{r}$ (le ko seštevamo po najbližjih sosedih, smo med celicama).

Slednje velja, ker:
$\int(\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})H\Phi_A(\vec{r}))^* d\vec{r} = \int \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_A^*(\vec{r})H^*\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r} = \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} t.$
Pri zadnjem enačaju smo seveda upoštevali, da je H hermitski.

Tako lahko zapišemo:

$$B_1 \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} t^*(\vec{b}) + B_2\epsilon_{S_2} = B_1\epsilon(\vec{k}) \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \int \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} + B_2\epsilon(\vec{k}) \int \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r}.$$

V drugem členu na levi in na desni strani enačbe smo izgubili vsoto, ker smo rekli, da ima prekrivalni integral neničelno vrednost le takrat, ko $\vec{R}=0$. V prvih dveh členih pa seštevamo le po najbližjih sosedih (na desni smo rekli $\vec{b} = \vec{R} + \vec{b}$).

Upoštevamo še:
$\int \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b})\Phi_G(\vec{r}-\vec{b})d\vec{r} = 1$
$\int \Phi_G^*(\vec{r}-\vec{b}-\vec{R})\Phi_A(\vec{r}-\vec{R})d\vec{r} = 0$ (gvaninov elektron ima velik vpliv na gvaninu, majhen na adeninu)

ter dobimo izraz:

$$B_1 t^*(\vec{b}) \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} + B_2\epsilon_{S_2} \quad = \quad B_2\epsilon(\vec{k}).$$

Tako lahko dobljeni enačbi zapišemo še enkrat:
$B_1(\epsilon_{S_1} - \epsilon(\vec{k})) + B_2 t(\vec{b}) \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 0$
$B_1 t^*(\vec{b}) \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} + B_2(\epsilon_{S_2} - \epsilon(\vec{k})) = 0.$

To pa lahko seveda zapišemo v obliki:

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Kjer je matrika sistema enaka:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \epsilon_{S_1} - \epsilon(\vec{k}) & t(\vec{b})\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \\ t^*(\vec{b})\sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} & \epsilon_{S_2} - \epsilon(\vec{k}) \end{pmatrix}.$$

Netrivialno rešitev dobimo, če rečemo, da je $det\mathcal{A} = 0$. Torej:

$(\epsilon_{S_1} - \epsilon)(\epsilon_{S_2} - \epsilon) - tt^* \sum e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \sum e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 0$
$\epsilon^2 - \epsilon(\epsilon_{S_1} + \epsilon_{S2}) - |t|^2 |\sum e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}|^2 = 0.$

Oziroma: $\epsilon(\vec{k})_{1,2} = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}\pm\sqrt{\epsilon_{S_1}^2+\epsilon_{S_2}^2-\epsilon_{S_1}\epsilon_{S_2}+4|t|^2|\sum e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}|^2}}{2}$.

$\vec{R}$ po katerem seštevamo pa določimo iz pogoja, da:
$|\vec{R}+\vec{b}| = |\vec{b}|$ $\quad |\vec{R}-\vec{b}| = |\vec{b}|$
$m_1 a + \frac{a}{2} = \frac{a}{2}$ $\quad m_1 a - \frac{a}{2} = \frac{a}{2}$
$m_1 = 0$ $\quad m_1 = 1$
$\vec{R}_1 = 0$ $\quad \vec{R}_2 = a(1,0,0)$.

Označimo $N = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2}$, $M = \epsilon_{S_1}^2 + \epsilon_{S_2}^2 - \epsilon_{S_1}\epsilon_{S_2} = (\epsilon_{S_1} - \epsilon_{S_2})^2$ ter zapišimo izraz za $\epsilon(\vec{k})$ z razpisano vsoto:

$$
\begin{aligned}
\epsilon(\vec{\mathbf{k}}) &= N \pm \frac{\sqrt{M+4|t|^2|\sum e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}|^2}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+4|t|^2|1+e^{ik_x a}|^2}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+4|t|^2|1+\cos(k_x a)+i\sin(k_x a)|^2}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+4|t|^2((1+\cos(k_x a))^2+\sin^2(k_x a))}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+4|t|^2(1+2\cos(k_x a)+1)}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+4|t|^2 2(1+\cos(k_x a))}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+8|t|^2 2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}}{2} = \\
&= N \pm \frac{\sqrt{M+16|t|^2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}}{2} = \\
&= \frac{\boldsymbol{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}}{\mathbf{2}} \pm \frac{\sqrt{(\boldsymbol{\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2}})^{\mathbf{2}}+\mathbf{16|t|^2 2}\cos^{\mathbf{2}}(\frac{\mathbf{k_x a}}{\mathbf{2}})}}{\mathbf{2}}.
\end{aligned} \tag{1}
$$

To seveda predstavlja iskano <u>disperzijo elektronske energije</u>.

1.1.5 Skica disperzije elektronske energije

Na Slika2 je narisana disperzija elektronske energije. Zgornji pas (Δ^+) dobimo, če v enačbi (1) vzamemo pozitivni predznak pred korenom, spodnji (Δ^-) pa, če vzamemo negativnega. Vmesni prostor pa predstavlja prepovedan pas s širino Δ. Vidimo, da je minimum pri pasu Δ^- enak maksimumu pasu $\Delta+$. Adenini nastopajo pri $k_x = 0, \frac{2\pi}{a}, \ldots$, gvanini pa pri $k_x = \frac{\pi}{a}, \frac{3\pi}{a}, \ldots$

1.1.6 Širina pasu

Na Slika2 so označeni pasovi, ki so omejeni z:
$\epsilon_{max+,min-}(k=0) = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} \pm \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2}$

$\epsilon_{max-,min+}(k=\frac{\pi}{a}) = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} \pm \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2}}{2}$.

Če gledamo le zgornji pas:

$\epsilon^+_{max} = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2}$

$\epsilon^+_{min} = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2}}{2} = \epsilon_{S_2}$, kjer smo seveda upoštevali, da $\epsilon_{S_2} > \epsilon_{S_2}$.

Oziroma, če gledamo le spodnjega:

$\epsilon^-_{max} = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} - \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2}}{2} = \epsilon_{S_1}$, kjer smo tudi upoštevali, da $\epsilon_{S_2} > \epsilon_{S_2}$

$\epsilon^-_{min} = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} - \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2}$.

Tako lahko zapišemo širino pasu:

- $\Delta^+ = \epsilon^+_{max} - \epsilon^+_{min} = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2} - \epsilon_{S_2} =$
  $= \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2}$
- $\Delta^- = \epsilon^-_{max} - \epsilon^-_{min} = \epsilon_{S_2} - \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2} =$
  $= \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2}$

Torej velja $\Delta^+ = \Delta^-$.

Širina pasu je potemtakem enaka:

$\boldsymbol{\Delta}^+ = \boldsymbol{\Delta}^- = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{2} = 0,298eV \sim \mathbf{3eV}$.

Širina prepovedanega pasu pa:

$\boldsymbol{\Delta} = \epsilon^+_{min} - \epsilon^-_{max} = \epsilon_{S_2} - \epsilon_{S_1} = \mathbf{0,24eV}$

1.2 Efektivna elektronska masa na dnu in na vrhu pasov ter energijska odvisnost gostote elektronskih stanj

1.2.1 Efektivna elektronska masa

Efektivno elektronsko maso izračunamo po formuli: $m^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial\vec{k}^2} = \frac{1}{\hbar^2}M^{-1}$.

$\frac{\partial\epsilon}{\partial k} = \pm\frac{16|t|^2 2\cos(\frac{k_x a}{2})(-\sin(\frac{k_x a}{2})\frac{a}{2}}{4\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}} = \pm\frac{2|t|^2 a(-\sin(k_x a))}{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}}$,

kjer smo seveda upoštevali $2\cos(\frac{k_x a}{2})\sin(\frac{k_x a}{2}) = \sin(k_x a)$.

$M^{-1} = \frac{\partial^2\epsilon}{\partial k^2} = \pm\frac{2|t|^2 a(-\cos(k_x a))a\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2\cos^2(\frac{k_x a}{2})} + \alpha}{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}$,

kjer je $\alpha = 2|t|^2 a\sin(k_x a)\frac{16|t|^2 2\cos(\frac{k_x a}{2})(-\sin(\frac{k_x a}{2}))\frac{a}{2}}{2\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}}$.

Torej: $M^{-1} = \pm\frac{2|t|^2 a^2(-\cos(k_x a))\sqrt{\dots}+8|t|^2 a^2(-\sin^2(k_x a))\frac{1}{\sqrt{\dots}}}{\sqrt{\dots}^2}$ in

$m^{-1}_{max+,min-}(k=0,\frac{2\pi}{a}) = \pm\frac{1}{\hbar^2}\frac{-2|t|^2 a^2\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2} = \pm\frac{1}{\hbar^2}\frac{-2|t|^2 a^2}{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2}}$ ter

$m^{-1}_{min+,max-}(k=\frac{\pi}{a}) = \pm\frac{1}{\hbar^2}\frac{2|t|^2a^2\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2}}{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2} = \pm\frac{1}{\hbar^2}\frac{2|t|^2a^2}{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2}} = \pm\frac{1}{\hbar^2}\frac{2|t|^2a^2}{\epsilon_{S_2}-\epsilon_{S_1}}$, kjer smo upoštevali, da $\epsilon_{S_2} > \epsilon_{S_1}$.

S številkami:

- $m^{-1}_{max+,min-} = \pm(-6,3910^{29}\frac{1}{kg})$
- $m^{-1}_{min+,max-} = \pm(2,2210^{30}\frac{1}{kg})$.

Torej je efektivna elektronska masa glede na pas in ekstrem enaka:

predznak, pas	ekstrem	$m^{-1}[\frac{1}{kg}]$	$m[kg]$
- spodnji	max	$-2,2210^{30}$	$-4,5010^{-31}$
	min	$+6,3910^{29}$	$+1,5610^{-30}$
+ zgornji	max	$-6,3910^{29}$	$-1,5610^{-31}$
	min	$+2,2210^{30}$	$+4,5010^{-31}$

To je tudi prikazano na Slika3, kjer je očitno, da je na vrhu obeh pasov efektivna elektronska masa negativna (kot da bi imeli tu vrzeli), na dnu pa je pozitivna (kakor da bi imeli elektrone). Opazimo lahko še, da je na dnu zgornjega/spodnjega pasu efektivna elektronska masa po absolutni vrednosti enaka tisti na vrhu spodnjega/zgornjega (enako vrzeli kot elektronov).

1.2.2 Gostota stanj

Gostoto elektronskih stanj sem dobila po enačbi: $g_n(\epsilon) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\frac{2\pi}{a}} \delta(\epsilon - \epsilon_n(\vec{k}))d\vec{k}$,
kjer sem vstavila za $\epsilon_n(\vec{k}) = \frac{\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}}{2} \pm \frac{\sqrt{(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2+16|t|^2 2\cos^2(\frac{k_x a}{2})}}{2}$ in vse skupaj pointegrirala po primitivni celici.

Za sam izračun sem uporabila Mathematica-o, ki je dala rezultat predstavljen na Slika4. Rezultat je enak ne glede na to ali za ϵ_n vstavimo zgornji ali pa spodnji pas (če uporabimo za izračun zgornji pas (v disperziji vzamemo +), dobimo v rezultatu tudi gostoto stanj za spodnji).

Seveda pa lahko gostoto elektronskih stanj izračunamo tudi s pomočjo gradienta (integriramo po ploskvi konstantne energije S_ϵ v 3D, po krivulji konstantne energije l_ϵ v 2D...):

$g_n(\epsilon) = \int_{S_\epsilon}\frac{dS_k}{4\pi^3}\frac{1}{|\nabla_k\epsilon_n(k)|} = \int_{l_\epsilon}\frac{dl_k}{2\pi^2}\frac{1}{|\nabla_k\epsilon_n(k)|} = \int\frac{\delta(k_x^{'}-k_x)dk_x^{'}}{\pi}\frac{1}{|\frac{\partial\epsilon_n(k_x^{'})}{\partial k_x^{'}}|} = \frac{1}{\pi}\frac{1}{|\frac{\partial\epsilon_n(k_x)}{\partial k_x}|}$, kjer je

$|\frac{\partial\epsilon_n(k_x)}{\partial k_x}| = \frac{4a|t|^2\cos(\frac{ak_x}{2})\sin(\frac{ak_x}{2})}{\sqrt{16|t|^2\cos^2(\frac{ak_x}{2})+(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})^2}}$,
$k_x = \frac{2}{a}\arccos(\frac{1}{2|t|}\sqrt{\epsilon^2+\epsilon(\epsilon_{S_1}-\epsilon_{S_2})+\epsilon_{S_1}\epsilon_{S_2}}\ )$.

Tako pa lahko zapišemo končni izraz za gostoto stanj, ki je prikazana na Slika4:

$$g_n(\epsilon) = \frac{\sqrt{(2\epsilon-(\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2}))^2}}{\pi a\sqrt{(\epsilon-\epsilon_{S_1})(\epsilon-\epsilon_{S_2})}\sqrt{4|t|^2-\epsilon^2+4\epsilon(\epsilon_{S_1}+\epsilon_{S_2})-\epsilon_{S_1}\epsilon_{S_2}}}$$

1.3 Primer splošnega zaporedja adeninov ter gvaninov

Na Slika5 je prikazan model splošnega zaporedja adeninov ter gvaninov, ki ga lahko zapišemo kot $(A_k G_l)_n$, kjer $n \to \infty$.

1.3.1 Baza

Bazo v tem primeru predstavlja zaporedje k adeninov ter l gvaninov (ki se n-krat ponovi). Seveda tukaj postopamo popolnoma enako kot smo v nalogi 1.1.1. Tako lahko zapišemo našo bazo:
$\vec{r}_1 = 0$ *adenin*
$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 0)$
$\vec{r}_3 = 2\frac{a}{2}(1, 0, 0)$
...
$\vec{r}_k = (k-1)\frac{a}{2}(1, 0, 0)$
$\vec{r}_{k+1} = k\frac{a}{2}(1, 0, 0)$ *gvanin*
...
$\vec{r}_{k+l} = (k+l-1)\frac{a}{2}(1, 0, 0)$.

1.3.2 Primitivni vektorji

Primitivne vektorje določimo kot v nalogi 1.1.2 in s pomočjo Slika5:
$\vec{a}_1 = (k+l)\frac{a}{2}(1, 0, 0)$
$\vec{a}_2 = \alpha(0, 1, 0)$
$\vec{a}_3 = \beta(0, 0, 1)$.

1.3.3 Vektor Bravaisove mreže

Tudi tu se zgledujemo po prejšnji nalogi (1.1.3; $m_2 = m_3 = 0$) in uporabimo primitivne vektorje iz 1.3.2 ter zapišemo vektor Bravaisove mreže:

$$\vec{R} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3 = m_1(k+l)\frac{a}{2}(1, 0, 0).$$

1.3.4 Izračun disperzije elektronske energije

Kot v nalogi 1.1.4 tudi tu želimo dobiti izraz za disperzijo elektronske energije.

Valovna funkcija za $k+l$ elektronov pa je sedaj:

$\Psi = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}[B_1\Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) + B_2\Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2-\vec{R}) + B_3\Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_3-\vec{R}) + \ldots + B_k\Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_k-\vec{R}) +$
$+ \mathcal{B}_{k+1}\Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}-\vec{R}) + \ldots + \mathcal{B}_{k+l}\Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}-\vec{R})]$.

Tu sem seveda rekla, da B_i pripada adeninu, $\mathcal{B}_i$ pa gvaninu.

S tem nastavkom rešujemo $H\Psi = \epsilon(\vec{k})\Psi$ (ter se delamo, da imamo le $(k+l)$-atomov oz. da smo vedno v celici oz. da je vektor po katerem seštevamo vedno $\vec{R} = 0$).

Na Schrödingerjevo enačbo delujemo z:

1. $/\Phi^*_A(\vec{r}) \quad / \int d\vec{r}$

$B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2-\vec{R}) d\vec{r} +$
$+ B_3 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_3-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots + B_k \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_k-\vec{R}) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{B}_{k+1} \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{B}_{k+l} \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}-\vec{R}) d\vec{r} =$
$= B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \epsilon(\vec{k}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \epsilon(\vec{k}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2-\vec{R}) d\vec{r} +$
$+ B_3 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \epsilon(\vec{k}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_3-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots + B_k \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \epsilon(\vec{k}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_k-\vec{R}) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{B}_{k+1} \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \epsilon(\vec{k}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{B}_{k+l} \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \epsilon(\vec{k}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}-\vec{R}) d\vec{r} =$
$= B_1 \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) d\vec{r} + B_2 \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2-\vec{R}) d\vec{r} +$
$+ B_3 \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_3-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots + B_k \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_k-\vec{R}) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{B}_{k+1} \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{B}_{k+l} \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}-\vec{R}) d\vec{r}.$

Ponovno rečemo da velja:
$\epsilon_{S_1} = \int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}) d\vec{r}$
$t_{A-A} = t_A = \int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2) d\vec{r}$
$\int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}) d\vec{r} = 1$
$\int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_i) d\vec{r} = 0,\ i = 2 : (k+l).$
$\vec{r} - \vec{r}_i - \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}_i$
seveda seštevamo vedno v celici:$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$

Torej:
$B_1 \epsilon_{S_1} + B_2 t_A + B_3 \int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_3) d\vec{r} + \ldots + B_k \int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_k) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{B}_{k+1} \int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}) d\vec{r} + \ldots + \mathcal{B}_{k+l} \int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}) d\vec{r} =$
$= B_1 \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}) d\vec{r} + B_2 \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2) d\vec{r} +$
$+ B_3 \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_3) d\vec{r} + \ldots + B_k \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_k) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{B}_{k+1} \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}) d\vec{r} + \ldots + \mathcal{B}_{k+l} \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*_A(\vec{r}) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}) d\vec{r} =$
$= B_1 \epsilon(\vec{k}).$

Sedaj pa še upoštevamo le preskakovanja med sosedi oz.:
$\int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_i) d\vec{r} = 0,\ i = 3 : k$
$\int \Phi^*_A(\vec{r}) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_i) d\vec{r} = 0,\ i = (k+1) : (k+l).$

$$B_1 \epsilon_{S_1} + B_2 t_A = B_1 \epsilon(\vec{k}).$$

2. $/\Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) \quad / \int d\vec{r} \qquad i = 2 : (k+l)$

$B_1 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) d\vec{r} + B_2 \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{A}_i \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots +$

$+ \mathcal{B}_{k+l} \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}-\vec{R}) d\vec{r} =$
$= B_1 \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi_A(\vec{r}-\vec{R}) d\vec{r} + B_2 \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_2-\vec{R}) d\vec{r} +$
$\ldots +$
$+ \mathcal{A}_i \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i-\vec{R}) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{B}_{k+l} \epsilon(\vec{k}) \int \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Phi^*_{A,G}(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}-\vec{R}) d\vec{r}$, kjer

$$\Phi^*_{A,G} = \begin{cases} \Phi^*_A \quad \text{za} \quad i = 1:k \\ \Phi^*_G \quad \text{za} \quad i = (k+1):(k+l) \end{cases}$$

$$\mathcal{A}_i = \begin{cases} B_i \quad \text{za} \quad i = 1:k \\ \mathcal{B}_i \quad \text{za} \quad i = (k+1):(k+l) \end{cases}$$

$$\epsilon_{S_i} = \begin{cases} \epsilon_{S_1} \quad \text{za} \quad i = 1:k \\ \epsilon_{S_2} \quad \text{za} \quad i = (k+1):(k+l) \end{cases}$$

$|t_{A-A}| = t_A = \int \Phi^*_A(\vec{r}-\vec{r}_{j-1}) H \Phi_A(\vec{r}-\vec{r}_j) d\vec{r} = t_{j-1}$, kjer $j = 2:k$
$|t_{G-G}| = t_G = \int \Phi^*_G(\vec{r}-\vec{r}_{j-1}) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_j) d\vec{r} = t_{j-1}$, kjer $j = (k+2):(k+l)$
$|t_{A-G}| = t = \int \Phi^*_A(\vec{r}-\vec{r}_k) H \Phi_G(\vec{r}-\vec{r}_{k+1}) d\vec{r} = t_k$

$$|t_i| = \begin{cases} t_A \quad \text{za} \quad i = 1:(k-1) \\ t_G \quad \text{za} \quad i = (k+1):(k+l-1) \\ t \quad \text{za} \quad i = k \end{cases}$$

seštevamo po celici:$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$

Vse to upoštevamo:
$B_1 \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi(\vec{r}) d\vec{r} + B_2 \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi(\vec{r}-\vec{r}_2) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{A}_{i-1} \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi(\vec{r}-\vec{r}_{i-1}) d\vec{r} + \mathcal{A}_i \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{A}_{i+1} \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi(\vec{r}-\vec{r}_{i+1}) d\vec{r} + \ldots +$
$\mathcal{B}_{k+l} \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) H \Phi(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}) d\vec{r} =$
$= B_1 \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi(\vec{r}) d\vec{r} + B_2 \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi(\vec{r}-\vec{r}_2) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{A}_{i-1} \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi(\vec{r}-\vec{r}_{i-1}) d\vec{r} + \mathcal{A}_i \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) d\vec{r} +$
$+ \mathcal{A}_{i+1} \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi(\vec{r}-\vec{r}_{i+1}) d\vec{r} + \ldots +$
$+ \mathcal{B}_{k+l} \epsilon(\vec{k}) \int \Phi^*(\vec{r}-\vec{r}_i) \Phi(\vec{r}-\vec{r}_{k+l}) d\vec{r}.$

Sedaj pa še upoštevamo vse od prej (preskakovanja med sosedi. . .):

$$\mathcal{A}_{i-1} t^*_{i-1} + \mathcal{A}_i \epsilon_{S_i} + \mathcal{A}_{i+1} t_i = \mathcal{A}_i \epsilon(\vec{k}).$$

Tako lahko dobljen sistem enačb zapišemo še enkrat:
$B_1(\epsilon_{S_1} - \epsilon(\vec{k})) + B_2 t_A = 0$ 1.vrstica
$\mathcal{A}_{i-1} t^*_{i-1} + \mathcal{A}_i(\epsilon_{S_i} - \epsilon) + \mathcal{A}_{i+1} t_i = 0$ i-ta vrstica
$\mathcal{B}_{k+l-1} t^*_G + \mathcal{B}_{k+l}(\epsilon_{S_1} - \epsilon(\vec{k})) = 0$ (k+l)-ta vrstica

To pa lahko seveda zapišemo v obliki:

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ . \\ . \\ . \\ B_k \\ \mathcal{B}_{k+1} \\ . \\ . \\ . \\ \mathcal{B}_{k+l} \end{pmatrix} = 0.$$

Če pa zapišemo matriko sistema, kjer smo poimenovali$\epsilon_{S_1} - \epsilon = \xi_1$, $\epsilon_{S_2} - \epsilon = \xi_2$, pa dobimo:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \xi_1 & t_A & & & & & & & & & & & \\ t_A^* & \xi_1 & t_A & & & & & & & & & & \\ & t_A^* & \xi_1 & t_A & & & & & & & & & \\ & & & . & & & & & & & & & \\ & & & & . & & & & & & & & \\ & & & & & . & & & & & & & \\ & & & & & t_A^* & \xi_1 & t & & & & & \\ & & & & & & t^* & \xi_2 & t_G & & & & \\ & & & & & & & t_G^* & \xi_2 & t_G & & & \\ & & & & & & & & & . & & & \\ & & & & & & & & & & . & & \\ & & & & & & & & & & & . & \\ & & & & & & & & & & t_G^* & \xi_2 & t_G \\ & & & & & & & & & & & t_G^* & \xi_2 \end{pmatrix}.$$

Sedaj pa moramo upoštevati še to, da nimamo le ene celice ampak neskončno. To naredimo tako, da v prvi ter zadnji vrstici dodamo še po en člen v matriko, katera povesta kako vplivajo sosednji gradniki sosednjih celic na obravnavano: vedno imamo stik gvanina ter adenina (t) ter vsoto po najbližjih sosedih. Torej:

$$
\mathcal{A} = \begin{pmatrix}
\xi_1 & t_A & & & & & & & & t\sum_{\vec{R}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{R}} \\
t_A^* & \xi_1 & t_A & & & & & & & \\
 & t_A^* & \xi_1 & t_A & & & & & & \\
 & & & \ddots & & & & & & \\
 & & & t_A^* & \xi_1 & t & & & & \\
 & & & & t^* & \xi_2 & t_G & & & \\
 & & & & & t_G^* & \xi_2 & t_G & & \\
 & & & & & & & \ddots & & \\
 & & & & & & & t_G^* & \xi_2 & t_G \\
t^*\sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} & & & & & & & & t_G^* & \xi_2
\end{pmatrix}.
$$

Seštevamo pa seveda po vektorjih Bravaisove mreže $\vec{R}$, ki sta enaka:

$|\vec{R} + \vec{r}_{k+l}| = |\vec{r}_{k+l}|$
$m_1(k+l)\frac{a}{2} + (k+l-1)\frac{a}{2} = (k+l-1)\frac{a}{2}$
$m_1 = 0$
$\vec{R}_1 = 0.$

$|\vec{R} - \vec{r}_{k+l}| = |\vec{r}_{k+l}|$
$m_1(k+l)\frac{a}{2} - (k+l-1)\frac{a}{2} = (k+l-1)\frac{a}{2}$
$m_1 = \frac{2(k+l-1)}{k+l}$
$\vec{R}_2 = a(k+l-1)(1,0,0).$

Iz matrike $\mathcal{A}$ je očitno, da če rečemo, da $k = l = 1$, dobimo matriko sistema iz 1.1.4, kar je v redu (preizkus pravilnosti matrike). Očitno je tudi, da je matrika $\mathcal{A}$ hermitska.

Zgornjo matriko sem še malo bolj poenostavila s tem, ko sem rekla, da $t_A^* = t_A$, $t_G^* = t_G$, $t^* = t$ ter $t_A = t_G = t$ (slednje, ker nimamo podatkov za posamezna prekrivanja):

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \xi_1 & t & & & & & & & & & t(1+e^{ik_x a(k+l-1)}) \\ t & \xi_1 & t & & & & & & & & \\ & t & \xi_1 & t & & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & & & \\ & & & t & \xi_1 & t & & & & & \\ & & & & t & \xi_2 & t & & & & \\ & & & & & t & \xi_2 & t & & & \\ & & & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & & t & \xi_2 & t & \\ t(1+e^{-ik_x a(k+l-1)}) & & & & & & & & t & \xi_2 & \end{pmatrix}.$$

Netrivialno rešitev dobimo, če rečemo, da je $det\mathcal{A} = 0$. Po osnovnem izreku algebre vemo, da imamo $(k + l)$ ničel od katerih je lahko npr. $(2m)$ kompleksno konjugiranih ničel, preostanek $(k + l - 2m)$ pa so realne. Pomembno je, da v našem primeru vedno dobimo pri računanju determinante skupaj člena $t(1 + e^{-ik_x a(k+l-1)})$ ter $t(1 + e^{ik_x a(k+l-1)})$: enkrat sta skupaj v produktu, drugič pa kot vsota. Rezultat je vedno realen:

$produkt = (1 + e^{ik_x a(k+l-1)})(1 + e^{-ik_x a(k+l-1)}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} = |\sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}|^2 = \Re^2 + \Im^2 =$
$= (1 + \cos(k_x a(k + l - 1)))^2 + \sin^2(k_x a(k + l - 1)) = 2(1 + \cos(k_x a(k + l - 1))) = 4\cos^2(\frac{k_x a(k+l-1)}{2})$

$vsota = (1 + e^{ik_x a(k+l-1)}) + (1 + e^{-ik_x a(k+l-1)}) = 1 + \cos(k_x a(k + l - 1)) + i \sin(k_x a(k + l - 1)) + 1 +$
$+ \cos(k_x a(k+l-1)) - i \sin(k_x a(k+l-1)) = 2(1+\cos(k_x a(k+l-1))) = 4\cos^2(\frac{k_x a(k+l-1)}{2}) = produkt$

Torej je pravzaprav vseeno ali je v zgornjem desnem izvendiagonalnem elementu $t\sum_{\vec{R}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ ali $t\sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ oz. spodnjem levem izvendiagonalnem elementu $t^* \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ ali $t^* \sum_{\vec{R}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{R}}$. Pomembno je le, da imamo ta dva člena, saj se v njiju skriva odvisnost od k_x.

Seveda pa v našem primeru ne moremo kar iz $det\mathcal{A} = 0$ napisati rešitve za disperzijo elektronske energije (ničel polinoma), saj med drugim niti ne vemo, kakšen je k, l. Seveda nisem šla iskati rešitve našega sistema nasplošno. Za primerjavo sem vzela sistem dveh adeninov ter dveh gvaninov oz. $k = l = 2$.

Od prej vemo, da če je $k = l = 1$, imamo dve realni ničli (dva prevodna pasova, en prepovedan). V primeru, ko $l = k = 2$, sem dobila analitičen izraz za disperzijo elektronske energije, ki je prikazana na Slika6. Le-to sem pa na Slika7 primerjala z disperzijo elektronske energije za $k = l = 1$ in na podlagi rezultatov sklepala na sistem večjega reda. Na Slika7 predstavljata spodnji krivulji disperzijo elektronske energije za $k = l = 1$, vse ostale krivulje (višje) pa pripadajo disperziji za $k = l = 2$. Očitno je, da se s povečanjem števila adeninov in gvaninov v naši bazi poveča tudi število prevodnih pasov (ustreza številu gradnikov v bazi oz. je enako $(k + l)$. Seveda se sama širina prevodnih pasov z večjim $(k+l)$ zmanjša in tem majša je, čim bolj nezunanji gradnik (adenin, gvanin) v bazi predstavlja dani pas. Torej: ko gre $k \to \infty$ ($\frac{k}{l} = konst.$), tem bolj ozki so prevodni pasovi ter pri tem večjih energijah se nahajajo. Na Slika7 se tudi vidi, da je število ekstremov za posamezen $(k+l)$ enako v vseh pasovih ter da se maksimi ter minimi iz pasa v pas menjujejo oz. z drugimi besedami: če je na nekem pasu v neki točki minimum, je na njemu sosednjima pasoma v isti točki maksimum ter obratno. Vidi se tudi, da se z večanjem $(k+l)$ veča tudi število ekstremov.

Primerjala sem tudi efektivne mase oz. vrednosti drugih odvodov v sovpadajočih ekstremih (pri vsakem ekstremu najnižjega nivoja, imamo vedno ekstrem tudi na višjem pasu):

drugi odvod v $k_x = \frac{\pi}{a}$	vrednost drugega odvoda	drugi odvod v $k_x = 0$	vrednost drugega odvoda
ϵ_{min}^{++}	$0,535281$	ϵ_{max}^{++}	$-0,314661$
ϵ_{max}^{+}	$-0,128064$	ϵ_{min}^{+}	$0,0209519$
ϵ_{min}^{-}	$0,128064$	ϵ_{max}^{-}	$-0,0209519$
ϵ_{max}^{--}	$-0,535281$	ϵ_{min}^{--}	$0,314661$
ϵ_{min}^{V}	$0,154133$	ϵ_{max}^{V}	$-0,0442899$
ϵ_{max}^{M}	$-0,154133$	ϵ_{min}^{M}	$0,0442899$

Tu so seveda vrednosti drugih odvodov v enakih enotah (da jih lahko primerjamo); $\epsilon_{max}^{++}\ldots$ so točke na krivuljah narisane na Slika7, $\epsilon_{max,min}^{M}$ pa je maksimum, minimum spodnjega pasu za $k = l = 1$, $\epsilon_{max,min}^{V}$ pa maksimum, minimum zgornjega za $k = l = 1$. Vidimo, da je efektivna masa v minimih pozitivna (elektroni), v maksimih pa negativna (vrzeli). Iz tabele lahko preberemo, da je efektivna elektronska masa na zunanjih pasovih po absolutni vrednosti večja od vseh pasov za dana k, l ter da se z večanjem $(k+l)$ veča tudi masa na zunanjih pasovih glede na nižje zunanje pasove.

Očitno je (Slika7), da imamo $k+l-1$ prepovedanih pasov (če štejemo prvega od najnižjega spodnjega dalje) v gostoti elektronskih stanj. Za širino pasov pa sem potrebovala vrednosti energije v ekstemih pasov:

pas	$\epsilon[eV]$ v $k_x = \frac{\pi}{a}$	$\epsilon[eV]$ v $k_x = 0$
$\epsilon{+}{+}$	$4,98986$	$5,17823$
ϵ^{+}	$4,80248$	$4,77823$
ϵ^{-}	$4,47752$	$4,50177$
ϵ^{--}	$4,29014$	$4,10177$
ϵ^{V}	$2,76$	$3,05761$
ϵ^{M}	$2,52$	$2,22239$

Iz teh vrednosti pa dobimo širino prepovedanih pasov $(\Delta\epsilon)$:

pas	$\Delta\epsilon[eV]$
$\epsilon{+}{+},+$	$0,18738$
$\epsilon^{+,-}$	$0,27646$
$\epsilon^{-,--}$	$0,18738$
$\epsilon^{V,M}$	$0,24$

Kjer $\epsilon{+}{+},+\ldots$ predstavlja prepovedani pas med pasom $\epsilon{+}{+}$ (najvišji pri $k = l = 2$) ter $\epsilon+$. Opazimo lahko (iz zgornje tabele), da širina sredinskega prepovedanega pasu raste s $(k+l)$ in hkrati pada za dan $(k+l)$ od centralnega pasu navzven. Vidimo lahko tudi, da imajo pasovi, ki pripadajo gradnikom, ki ležijo simetrično glede na sredino baze, enako širok prepovedan pas.

Iz tabele vrednosti energij v ekstremih pa lahko določimo tudi širino prevodnih pasov:

pas	$\Delta\epsilon[eV]$
$\epsilon{+}{+}$	$0,18832$
$\epsilon+$	$0,02425$
$\epsilon-$	$0,02425$
ϵ^{--}	$0,18837$
ϵ^V	$0,29761$
ϵ^M	$0,29761$

Razberemo pa lahko tudi, da se širina prevodnih pasov z naraščajočim $(k+l)$ manjša in da je za pasove, ki pripadajo gradnikom znotraj baze, manjša kot za tiste proti zunanjosti celice.

Tako lahko sklepamo, da ko se veča $(k+l)$, gre širina prevodnih pasov proti 0. Tako imamo namesto dveh končno širokih prevodnih pasov v gostoti stanj (Slika4), $(k+l)$ pasov, katerih širina gre proti 0. Torej, ko $k \to \infty$ in hkrati velja $\frac{l}{k} = konstanta$, dobimo za gostoto stanj δ-funkcije pri določenih energijah, med njimi pa so prepovedani pasovi. Seveda ta gostota stanj ni zvezna niti na majhnem intervalu, ampak je popolnoma diskretna.

2 Muffin tin potencial

Elektroni čutijo šibak $2D$ potencial, ki je predstavljen v obliki okroglih potencialnih jam (Slika8) z radijem $r_0 = 0,15nm$ ter globino $V = -0,1eV$ (potencial zunaj jam je nič).

2.0.5 Vektorji Bravaisove mreže

Primitivne vektorje lahko preberemo iz Slika8:
$\vec{a}_1 = 2r_0(1,0,0)$
$\vec{a}_2 = 2r_0(\cos(\alpha), \sin(\alpha), 0) = 2r_0(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$
$\vec{a}_3 = a(0,0,1)$.

Vidimo tudi, da je $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = 2r_0$.

2.0.6 Vektorji recipročne mreže

Vektorje recipročne mreže izračunamo po formuli $\vec{b}_i = 2\pi\frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{|(\vec{a}_i, \vec{a}_j, \vec{a}_k)|}$, kjer indekse i, j, k ciklično permutiramo. Torej:

$\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = 4r_0^2(0,0,\frac{\sqrt{3}}{2}) = 2r_0^2(0,0,\sqrt{3})$
$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = 2r_0 a(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0) = r_0 a(\sqrt{3}, -1, 0)$
$\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = 2r_0 a(0,1,0)$

$|(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)| = |2r_0^2(0,0,\sqrt{3}) \cdot a(0,0,1)| = 2r_0^2 a\sqrt{3}$.

Tako dobimo vektorje recipročne mreže:

$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{r_0 a(\sqrt{3},-1,0)}{2r_0^2 a\sqrt{3}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0)$
$\vec{b}_2 = 2\pi\frac{2r_0 a(0,1,0)}{2r_0^2 a\sqrt{3}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(0,1,0)$
$\vec{b}_3 = 2\pi\frac{2r_0^2(0,0,\sqrt{3})}{2r_0^2 a\sqrt{3}} = \frac{2\pi}{r_0}(0,0,1).$

Tudi tu velja $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}$.

Recipročna mreža, ki pa jo dobimo, je prikazana na Slika9.

2.1 Razcepi med najnižjima elektronskima pasovoma na robovih in v vogalih Brillouinove cone ter širina elektronskega pasu z najnižjo energijo

Za določitev razcepa moramo poznati tudi Fourierove komponente, ki jih določimo po formulah:
$U_0 = \frac{1}{v}\int_{celica} U(\vec{r})d\vec{r}$ ter
$U_{\vec{K}} = \frac{1}{v}\int_{celica} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}U(\vec{r})d\vec{r}$, kjer je
v volumen primitivne celice (na Slika8 W-S celica) po kateri tudi integriramo.

Torej:
$U_{\vec{K}} = \frac{1}{v_{ws}}\int_{ws} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}U(\vec{r})d\vec{r} = \frac{V}{v_{ws}}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{r_0} rdre^{-iKr(\cos\phi\cos\Phi+\sin\phi\sin\Phi)} =$
$= \frac{V}{v_{ws}}\int_0^{r_0} rdr2\pi\mathcal{J}_0(-Kr\sqrt{\cos^2\Phi+\sin^2\Phi}) = 2\pi\frac{V}{v_{ws}}\int_0^{r_0} r\mathcal{J}_0(-Kr)dr =$
$= \frac{2\pi V}{v_{ws}}\int \frac{x}{K}\mathcal{J}_0(-x)\frac{dx}{K} = \frac{2\pi V}{v_{ws}K^2}\int(-x)\mathcal{J}_0(-x)(-dx) = \frac{2\pi V}{v_{ws}K^2}(-x)\mathcal{J}_1(-x) =$
$= -\frac{2\pi V}{v_{ws}K^2}Kr\mathcal{J}_1(-Kr)|_0^{r_0} = \frac{2\pi V}{v_{ws}K}r_0\mathcal{J}_1(Kr_0)$

Pri drugem enačaju (prvi je po $U_{\vec{K}}$) sem upoštevala, da je $U(\vec{r}) \neq 0$ (oz. $U(\vec{r}) = V$) le na območju potencialne jame (na krogu z radijem r_0; integriramo torej le po krogu (v polarnih koordinatah)) ter da je $\vec{r} = r(\cos\phi, \sin\phi, 0)$ in $\vec{K} = K(\cos\Phi, \sin\Phi, 0)$.
Pri tretjem enačaju sem upoštevala, da je ničti Bessel enak: $\mathcal{J}_0(kr) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{ik(x\cos\alpha+y\sin\alpha)}d\alpha$, kjer $r = \sqrt{x^2+y^2}$, $x = \cos\Phi$, $y = \sin\Phi$ ter $k = -Kr$.
Pri petem sem rekla, da $x = Kr$ ter $dx = Kdr$.
Pri sedmem ter osmem sem upoštevala, da $\int\mathcal{J}_0(x)xdx = x\mathcal{J}_1(x)$.

Vidimo, da je dobljen $U_{\vec{K}}$ odvisen le od velikosti $\vec{K}$.

Da pa dobimo vrednost za $U_{\vec{K}}$, moramo vedeti še volumen oz. v našem primeru ploščino primitivne celice (Slika12):
$\tan\alpha = \frac{l}{2r_0} \Rightarrow l = \frac{2r_0}{\sqrt{3}}$
$w = r_0\frac{l}{2}\ \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\ r_0\frac{r_0}{\sqrt{3}}$
$v_{ws} = 12w = 12\frac{r_0^2}{2\sqrt{3}} = 2\sqrt{3}r_0^2.$

Tako da velja:
$\mathbf{U_{\vec{K}}} = \frac{2\pi V}{2\sqrt{3}r_0^2 K}r_0\mathcal{J}_1(Kr_0) = \frac{\pi\mathbf{V}}{\sqrt{3}\mathbf{r_0K}}\mathcal{J}_\mathbf{1}(\mathbf{Kr_0})$.

Po drugi strani pa je:
$\mathbf{U_0} = \frac{1}{v_{ws}}\int_0^{r_0} rdr\int_0^{2\pi} d\phi V = \frac{1}{2\sqrt{3}r_0^2}V2\pi\frac{r^2}{2}|_0^{r_0} = \frac{\pi V}{2\sqrt{3}r_0^2}V2\pi\frac{r_0^2}{2} = \frac{\pi V}{2\sqrt{3}} = \mathbf{0,907V} < 0.$

2.1.1 Rob

Če za določitev razcepa na robu uporabimo prve oz. prve ter druge najbližje sosede moramo vedeti (Slika10):

$U_0 = 0,907V < 0$
$U_1 = U_{\vec{K}_2} = U_{-\vec{K}_2} = U_{\vec{K}_3} = U_{-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_4} = U_{-\vec{K}_4} = U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} = U_{\vec{K}_4-\vec{K}_2} = U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4} =$
$= \frac{\pi V\sqrt{3}r_0}{\sqrt{3}r_0 2\pi}\mathcal{J}_1(\frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}r_0) = \frac{V}{2}\mathcal{J}_1(\frac{2\pi}{\sqrt{3}}) = 0.042V < 0$
$U_2 = U_{\vec{K}_4-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_3-\vec{K}_4} = \frac{\pi V\sqrt{3}r_0}{\sqrt{3}r_0\sqrt{7}2\pi}\mathcal{J}_1(\sqrt{\frac{7}{3}}\frac{2\pi}{r_0}r_0) = \frac{V}{2\sqrt{7}}\mathcal{J}_1(\sqrt{\frac{7}{3}}2\pi) = 0.026V < 0$
Vidimo, da je $|U_0| > |U_1| > |U_2|$.

$\vec{K}_2 = 2\vec{k}_R = \vec{b}_2$
$\vec{K}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
$\vec{K}_4 = -\vec{b}_1$

$\vec{k}_R - \vec{K}_2 = -\vec{k}_R$
$\vec{k}_R - \vec{K}_3 = (\frac{\vec{b}_2}{2} - \vec{b}_1 - \vec{b}_2) = -(\vec{b}_1 + \frac{\vec{b}_2}{2})$
$\vec{k}_R - \vec{K}_4 = \vec{b}_1 + \frac{\vec{b}_2}{2}$

$\vec{K}_3 - \vec{K}_2 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 - \vec{b}_2 = \vec{b}_1 = -\vec{K}_4$
$\vec{K}_4 - \vec{K}_2 = -\vec{b}_1 - \vec{b}_2 = -(\vec{b}_1 + \vec{b}_2) = -\vec{K}_3$
$\vec{K}_4 - \vec{K}_3 = -\vec{b}_1 - \vec{b}_1 - \vec{b}_2 = -(2\vec{b}_1 + \vec{b}_2) = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(\sqrt{3}, -2, 0)$

$|\vec{k}_R| = \frac{|\vec{b}_2|}{2} = \frac{\pi}{\sqrt{3}r_0}$
$K_2 = |\vec{b}_2| = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}$
$K_3 = K_4 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0} = K_2.$
$|\vec{K}_4 - \vec{K}_3| = \sqrt{\frac{7}{3}}\frac{2\pi}{r_0}$

$\epsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2$
$\epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2$
$\epsilon_3 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_3)^2$
$\epsilon_4 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_4)^2$

Če vzamemo torej le prve najbližje sosede:

pas, K	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{K})^2 - \epsilon]c_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}'} U_{\vec{K}'-\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}'} = 0$
$K_1 = 0$	$[\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_R} + U_0 c_{\vec{k}_R} + U_{\vec{K}_2}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} = 0$
K_2	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} + U_{-\vec{K}_2}c_{\vec{k}_R} + U_0 c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} = 0$

Sistem zapišemo v obliki:

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix} c_{\vec{k}_R} \\ c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} \end{pmatrix} = 0.$$

Matrika tega sistema je tako:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 - \epsilon + U_0 & U_{\vec{K}_2} \\ U_{-\vec{K}_2} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix}.$$

Sedaj rečemo, da $U_{\vec{K}_2} = U_{-\vec{K}_2} = U_1$ ter $\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 = \epsilon_1$ in $\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 = \epsilon_2$.
Za netrivialno rešitev velja, da: $det\mathcal{A} = 0$. Torej:
$(\epsilon_1 - \epsilon + U_0)(\epsilon_2 - \epsilon + U_0) - U_1^2 = 0$
$\epsilon^2 - \epsilon(\epsilon_1 + \epsilon_2 + 2U_0) + \epsilon_1\epsilon_2 + U_0(\epsilon_1 + \epsilon_2) + U_0^2 - U_1^2 = 0$
$\Rightarrow$ Razcep na robu:
$\epsilon_{\mathbf{M,V}} = \frac{\epsilon_1+\epsilon_2+2U_0 \pm \sqrt{(\epsilon_1+\epsilon_2+2U_0)^2 - 4(\epsilon_1\epsilon_2+U_0(\epsilon_1+\epsilon_2)+U_0^2-U_1^2)}}{2} = \mathbf{U_0} + \boldsymbol{\frac{\epsilon_1+\epsilon_2}{2}} \pm \boldsymbol{\frac{1}{2}}\sqrt{\boldsymbol{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4U_1^2}}$
Pri zadnjem enačaju sem upoštevala, da:
$\sqrt{}^2 = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + 4U_0^2 + 2\epsilon_1\epsilon_2 + 4\epsilon_1U_0 + 4\epsilon_2U_0 - 4\epsilon_1\epsilon_2 - 4U_0(\epsilon_1 + \epsilon_2) - 4U_0^2 + 4U_1^2 = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 - 2\epsilon_1\epsilon_2 + 4U_1^2 =$
$= (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4U_1^2$
Sedaj še upoštevajmo v izrazu za $\epsilon_{M,V}$, da je $(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 = (-\vec{k}_R)^2 = \vec{k}_R^2$ oz.
$\epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 = \epsilon_1$:

$\epsilon_{\mathbf{M,V}} = U_0 + \frac{2\epsilon_1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{4U_1^2} = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 \pm U_1 = \mathbf{U_0} + \boldsymbol{\frac{\hbar^2\pi^2}{6mr_0^2}} \pm \mathbf{U_1}$ kar je razcep čisto na sredini roba.

Zgornji nivo je: $\epsilon_V = U_0 + \epsilon_1 - U_1$,
spodnji pa: $\epsilon_M = U_0 + \epsilon_1 + U_1$.

Če vnesemo še podatke (za m uporabimo maso elektrona) pa dobimo:
$\epsilon_V = U_0 - U_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{6mr_0^2} = 8,71\ 10^{-19}J = 5,443eV$
$\epsilon_M = U_0 + U_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{6mr_0^2} = 8,70\ 10^{-19}J = 5,437eV$ Če pa bi vzeli še druge najbližje sosede:

pas, K	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{K})^2 - \epsilon]c_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}'} U_{\vec{K}'-\vec{K}}c_{\vec{k}-\vec{K}'} = 0$
$K_1 = 0$	$[\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_R} + U_0c_{\vec{k}_R} + U_{\vec{K}_2}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} + U_{\vec{K}_3}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_3} + U_{\vec{K}_4}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_4} = 0$
K_2	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} + U_{-\vec{K}_2}c_{\vec{k}_R} + U_0c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} + U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_3} + U_{\vec{K}_4-\vec{K}_2}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_4} = 0$
K_3	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_3)^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_R-\vec{K}_3} + U_{-\vec{K}_3}c_{\vec{k}_R} + U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} + U_0c_{\vec{k}_R-\vec{K}_3} + U_{\vec{K}_4-\vec{K}_3}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_4} = 0$
K_4	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_4)^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_R-\vec{K}_4} + U_{-\vec{K}_4}c_{\vec{k}_R} + U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} + U_{\vec{K}_3-\vec{K}_4}c_{\vec{k}_R-\vec{K}_3} + U_0c_{\vec{k}_R-\vec{K}_4} = 0$

Sistem zapišemo v obliki:

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix} c_{\vec{k}_R} \\ c_{\vec{k}_R-\vec{K}_2} \\ c_{\vec{k}_R-\vec{K}_3} \\ c_{\vec{k}_R-\vec{K}_4} \end{pmatrix} = 0.$$

Matrika tega sistema je tako:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2 - \epsilon + U_0 & U_{\vec{K}_2} & U_{\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_4} \\ U_{-\vec{K}_2} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 - \epsilon + U_0 & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_2} \\ U_{-\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_3)^2 - \epsilon + U_0 & U_{\vec{K}_4-\vec{K}_3} \\ U_{-\vec{K}_4} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_4} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_4} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_4)^2 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix}.$$

Sedaj rečemo, da:
$\epsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_R^2$
$\epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2$
$\epsilon_3 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_3)^2$
$\epsilon_4 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R - \vec{K}_4)^2$
$U_1 = U_{\vec{K}_2} = U_{-\vec{K}_2} = U_{\vec{K}_3} = U_{-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_4} = U_{-\vec{K}_4} = U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2}$
$U_2 = U_{\vec{K}_4-\vec{K}_3} = U_{\vec{K}_3-\vec{K}_4}$.
Martiko lahko tako zapišemo lepše:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 - \epsilon + U_0 & U_1 & U_1 & U_1 \\ U_1 & \epsilon_2 - \epsilon + U_0 & U_1 & U_1 \\ U_1 & U_1 & \epsilon_3 - \epsilon + U_0 & U_2 \\ U_1 & U_1 & U_2 & \epsilon_4 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix}.$$

Z Mathematico sem izračunala $det\mathcal{A} = 0$ in dobila štiri realne a zelo dolge rešitve. Zato sem se odločila, da raje predstavim rešitev za dani sistem tako, da že v matriki upoštevam enakosti med ϵ_i-ji za $i = 1:4$ (računam točno na sredini roba):
$(\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2 = (-\vec{k}_R)^2 = \vec{k}_R^2$
$(\vec{k}_R - \vec{K}_3)^2 = -(\vec{b}_1 + \frac{\vec{b}_2}{2})^2$
$(\vec{k}_R - \vec{K}_4)^2 = (\vec{b}_1 + \frac{\vec{b}_2}{2})^2$ oz.
$\epsilon_1 = \epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2}{3r_0^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mr_0^2}\frac{4}{3} = \frac{4}{3}\epsilon_3$
$\epsilon_3 = \epsilon_4 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{b}_1 + \frac{\vec{b}_2}{2})^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2}{3r_0^2}((0,\frac{1}{2},0) + (\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2},0))^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2}{3r_0^2}\frac{3}{4} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mr_0^2}$

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 - \epsilon + U_0 & U_1 & U_1 & U_1 \\ U_1 & \epsilon_1 - \epsilon + U_0 & U_1 & U_1 \\ U_1 & U_1 & \frac{3}{4}\epsilon_1 - \epsilon + U_0 & U_2 \\ U_1 & U_1 & U_2 & \frac{3}{4}\epsilon_1 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix}.$$

Za rešitev enačbe $det\mathcal{A} = 0$ dobim:

$\epsilon_i = U_0 + \epsilon_1 - U_1 \ldots$ zgornji nivo
$\epsilon_{ii} = U_0 + \frac{3}{4}\epsilon_1 - U_2 = U_0 + \epsilon_1 - U_2 - \frac{1}{4}\epsilon_1 \ldots$ popravljen spodnji nivo
$\epsilon_{iii,iv} = U_0 + \frac{1}{2}(U_1 + U_2) + \frac{7}{8}\epsilon_1 \pm \frac{1}{8}\sqrt{272U_1^2 + (\epsilon_1 - 4U_2)(4(2U_1 - U_2) + \epsilon_1)} \ldots$ razcep za višji "pas"
Ker je popravek razcepa majhen, predstavimo razcep na robu le s prvimi najbližjimi sosedi.

2.1.2 Vogal

Za določitev razcepa na vogalu sem uporabila le prve sosede (Slika11):

$U_0 = 0,907V < 0$
$U_1^{‘} = U_{\vec{K}_1^{‘}} = U_{-\vec{K}_1^{‘}} = U_{\vec{K}_2^{‘}} = U_{-\vec{K}_2^{‘}} = U_{\vec{K}_1^{‘}-\vec{K}_2^{‘}} = U_{\vec{K}_2^{‘}-\vec{K}_1^{‘}} = \frac{\pi V\sqrt{3}r_0}{\sqrt{3}r_0 2\pi}\mathcal{J}_1(\frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}r_0) = \frac{V}{2}\mathcal{J}_1(\frac{2\pi}{\sqrt{3}}) =$
$= 0.042V = U_1 < 0.$

Vidimo, da je $|U_0| > |U_1|$.

$\vec{k_V} = \frac{\vec{b_2}}{\sqrt{3}}(1,0,0) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(1,0,0)$
$\vec{K}_1^{'} = b_1(\cos\alpha, \sin\alpha, 0) = b_1(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
$\vec{K}_2^{'} = \vec{b}_1 = b_1(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0)$

$\vec{K}_1^{'} - \vec{K}_2^{'} = b_1(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0) - b_1(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0) = b_1(0,1,0)$
$\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'} = \frac{2\pi}{3r_0}(1,0,0) - \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(-\frac{1}{2\sqrt{3}}, -\frac{1}{2}, 0)$
$\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'} = \frac{2\pi}{3r_0}(1,0,0) - \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}(-\frac{1}{2\sqrt{3}}, \frac{1}{2}, 0)$

$|\vec{k}_V| = \frac{|\vec{b}_2|}{2}\frac{1}{\cos\alpha} = \frac{b_2}{\sqrt{3}}$ iz Slika11
$|\vec{K}_1^{'}| = |\vec{K}_2^{'}| = |\vec{K}_1^{'} - \vec{K}_2^{'}| = b_1$
$|\vec{k}_V|^2 = |\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'}|^2 = |\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'}|^2 = \frac{4\pi^2}{9r_0^2}$

$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_V^2 + U_0$
$\epsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'})^2 + U_0$
$\epsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'})^2 + U_0$. Uporabimo prve najbližje sosede:

pas, K	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{K})^2 - \epsilon]c_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}^{'}} U_{\vec{K}^{'}-\vec{K}} c_{\vec{k}-\vec{K}^{'}} = 0$
$K_0 = 0$	$[\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_V^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_V} + U_0 c_{\vec{k}_V} + U_{\vec{K}_1^{'}} c_{\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'}} + U_{\vec{K}_2^{'}} c_{\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'}} = 0$
$K_1^{'}$	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'})^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'}} + U_{-\vec{K}_1^{'}} c_{\vec{k}_V} + U_0 c_{\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'}} + U_{\vec{K}_2^{'} - \vec{K}_1^{'}} c_{\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'}} = 0$
$K_2^{'}$	$[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'})^2 - \epsilon]c_{\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'}} + U_{-\vec{K}_2^{'}} c_{\vec{k}_V} + U_{\vec{K}_1^{'} - \vec{K}_2^{'}} c_{\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'}} + U_0 c_{\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'}} = 0$

Sistem zapišemo v obliki:

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix} c_{\vec{k}_V} \\ c_{\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'}} \\ c_{\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'}} \end{pmatrix} = 0.$$

Matrika tega sistema je tako:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_V^2 - \epsilon + U_0 & U_{\vec{K}_1^{'}} & U_{\vec{K}_2^{'}} \\ U_{-\vec{K}_1^{'}} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'})^2 - \epsilon + U_0 & U_{\vec{K}_2^{'} - \vec{K}_1^{'}} \\ U_{-\vec{K}_2^{'}} & U_{\vec{K}_1^{'} - \vec{K}_2^{'}} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'})^2 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix}.$$

Sedaj rečemo, da $U_{\vec{K}_1^{'}} = U_{-\vec{K}_1^{'}} = U_{\vec{K}_2^{'}} = U_{-\vec{K}_2^{'}} = U_{\vec{K}_1^{'} - \vec{K}_2^{'}} = U_{\vec{K}_2^{'} - \vec{K}_1^{'}} = U_1$ ter uporabimo že prj definirane izraze za ϵ_i. Tako dobimo:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_V^2 - \epsilon + U_0 & U_1 & U_1 \\ U_1 & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'})^2 - \epsilon + U_0 & U_1 \\ U_1 & U_1 & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'})^2 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \epsilon_0 - \epsilon & U_1 & U_1 \\ U_1 & \epsilon_1 - \epsilon & U_1 \\ U_1 & U_1 & \epsilon_2 - \epsilon \end{pmatrix}.$$

Za netrivialno rešitev velja, da: $det\mathcal{A} = 0$. Torej:

$(\epsilon_0 - \epsilon)(\epsilon_1 - \epsilon)(\epsilon_2 - \epsilon) + 2U_1^3 - U_1^2(\epsilon_1 - \epsilon) - U_1^2(\epsilon_2 - \epsilon) - U_1^2(\epsilon_0 - \epsilon) = 0$
$(\epsilon_0 - \epsilon)(\epsilon_1 - \epsilon)(\epsilon_2 - \epsilon) - U_1^2(\epsilon_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2 - 3\epsilon) + 2U_1^3 = 0.$

Če se lotimo reševanja tega sistema (z Mathematica-o), dobimo ven tri dolge rešitve: dve sta kompleksno konjugirani ena pa je realna. V te tri rešitve vstavimo $\epsilon_0 = \epsilon_1 = \epsilon_2$ (to drži točno v vogalu, ker le-tu velja $|\vec{k}_V|^2 = |\vec{k}_V - \vec{K}_1^{\text{`}}|^2 = |\vec{k}_V - \vec{K}_2^{\text{`}}|^2$) ter dobimo razcep v vogalu:

$\epsilon_{\mathbf{I}} = \epsilon_{\mathbf{0}} + \mathbf{2U_1}\ldots$ enojna ničla
$\epsilon_{\mathbf{II,III}} = \epsilon_{\mathbf{0}} - \mathbf{U_1}\ldots$ dvojna ničla.

Torej se energija razcepi na dva nivoja: nedegeneriranega nižjega (ϵ_I) ter 2-krat degeneriranega višjega ($\epsilon_{II,III}$).

Isto rešitev dobimo, če gremo računati razcep tako, da že direktno v matriki $\mathcal{A}$ upoštevamo, da $\epsilon_0 = \epsilon_1 = \epsilon_2$:

$$\mathcal{A}_V = \begin{pmatrix} \epsilon_0 - \epsilon & U_1 & U_1 \\ U_1 & \epsilon_0 - \epsilon & U_1 \\ U_1 & U_1 & \epsilon_0 - \epsilon \end{pmatrix}.$$

Determinata te matrike pa je enaka:

$$det\mathcal{A}_V = -(\epsilon - 2U_1 - \epsilon_0)(\epsilon + U_1 - \epsilon_0)^2 = 0.$$

Iz tega pa se jasno vidi, da dobimo res enake rešitve kot zgoraj: $\epsilon_{\mathbf{I}} = \epsilon_0 + 2U_1$, $\epsilon_{\mathbf{II,III}} = \epsilon_0 - U_1$.

Če tudi tu vstavimo podatke, dobimo:
$\epsilon_{II,III} = \epsilon_0 - U_1 = U_0 + \frac{2\pi^2\hbar^2}{9mr_0^2} - U_1 = 11,66\ 10^{-19}J = 7,29eV,$
$\epsilon_I = \epsilon_0 + 2U_1 = U_0 + \frac{2\pi^2\hbar^2}{9mr_0^2} + 2U_1 = 11,64\ 10^{-19}J = 7,28eV.$

2.1.3 Širina elektronskega pasu

Na Slika13 je skicirana elektronska energija za naš primer: od $K = 0$ preko K_{roba} ter K_{vogala} in ponovno čez K_{roba} nazaj h $K = 0$ (spodnja slika na Slika13 to tudi prikazuje). Iz zgornje slike na Slika13 pa lahko razberemo velikosti pasov.

Nas zanima seveda le pas z najnižjo energijo oz.:

- širina pasu med robom ter vogalom za spodnji pas:
$\epsilon_I - \epsilon_M = U_0 + \frac{2\pi^2\hbar^2}{9mr_0^2} + 2U_1 - (U_0 + U_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{6mr_0^2}) = \frac{\hbar^2\pi^2}{18mr_0^2} + U_1 = 2,94\ 10^{-19}J = 1,84eV$
- širina elektronskega pasu z najnižjo energijo:
$\epsilon_I - U_0 = U_0 + \frac{2\pi^2\hbar^2}{9mr_0^2} + 2U_1 - U_0 = \frac{2\hbar^2\pi^2}{9mr_0^2} + 2U_1 = 11,67\ 10^{-19}J = 7,29eV.$
Slednji rezultat pa je tudi to kar iščemo.

2.2 Tenzor elektronske mase v sedlih na robu Brillouinove cone za elektronski pas z najnižjo energijo ter skica gostote stanj

2.2.1 Tenzor efektivne elektronske mase

Tenzor efektivne elektronske mase izračunamo po formuli:

$$m^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2\epsilon}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2\epsilon}{\partial k_x \partial k_y} \\ \frac{\partial^2\epsilon}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2\epsilon}{\partial k_y^2} \end{pmatrix}.$$

Seveda moramo za energijo vzeti $\epsilon_M = U_0 + \frac{\epsilon_1+\epsilon_2}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_1-\epsilon_2)^2 + 4U_1^2}$ ter upoštevati izraze za ϵ_i saj vsebujejo k_x, k_y ($\vec{k}_R = (k_x, k_y, 0)$) po katerih odvajamo in za K_2 iz naloge 2.1.1. Tako lahko zapišemo:

$$\epsilon_M = U_0 + \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_R^2 + (\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2) - \frac{1}{2}\sqrt{(\frac{\hbar^2}{2m})^2(\vec{k}_R^2 - (\vec{k}_R - \vec{K}_2)^2)^2 + 4U_1^2} =$$
$$= U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 - \frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}k_y + \frac{2\pi^2}{3r_0^2}) - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar^4}{m^2}(\frac{2\pi}{\sqrt{3}r_0}k_y - \frac{2\pi^2}{3r_0^2})^2 + 4U_1^2}.$$

Na tem mestu sem označila: $A = \frac{\hbar^2}{m}$, $B = \frac{\pi}{\sqrt{3}r_0}$ ter izračunala druge odvode:

$$\frac{\partial^2\epsilon_M}{\partial k_x^2} = A$$
$$\frac{\partial^2\epsilon_M}{\partial k_y^2} = A + \frac{2A^4(B-2k_y)^2B^4}{(A^2B^2(B-2k_y)^2+4U_1^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2A^2B^2}{\sqrt{A^2B^2(B-2k_y)^2+4U_1^2}}$$
$$\frac{\partial^2\epsilon_M}{\partial k_x\partial k_y} = \frac{\partial^2\epsilon_M}{\partial k_y\partial k_x} = 0.$$

Torej, če zapišemo tenzor efektivne elektronske mase:

$$m^{-1} = \frac{1}{mA}\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A - \frac{A^2B^2U_1^2}{(A^2B^2(B-k_y)^2+U_1^2)^{\frac{3}{2}}} \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} - \frac{AB^2U_1^2}{m(A^2B^2(B-k_y)^2+U_1^2)^{\frac{3}{2}}} \end{pmatrix}.$$

Nas seveda zanima efektivna masa v točki $\vec{k_R} = \frac{b_2}{2}(0,1,0)$. Torej $k_y = \frac{b_2}{2} = B$. Z drugimi besedami:

$$m^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} - \frac{AB^2}{m\sqrt{U_1^2}} \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{m} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} - \frac{\hbar^2\pi^2}{3m^2r_0^2\sqrt{U_1^2}} \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} 1,0989\ 10^{30}\frac{1}{kg} & 0 \\ 0 & -2,89573\ 10^{33}\frac{1}{kg} \end{pmatrix}.$$

Če pa zapišemo izraz za samo maso:

$$m = \begin{pmatrix} 9,1\ 10^{-31}kg & 0 \\ 0 & -3,45\ 10^{-34}kg \end{pmatrix}.$$

2.2.2 Gostota stanj

Gostota stanj v okolici sedla je skicirana na Slika14. V sedlu smo na Braggovi ravnini oz. tam gostota stanj divergira, drugod oz. daleč stran od Braggove ravnine pa gre proti konstanti.

2.3 Tenzor efektivne mase v maksimumu elektronskega pasu z najnižjo energijo

Kot v nalogi 2.2.1 potrebujemo izraz za splošen razcep v okolici vogala. Seveda iz determinante splošne matrike:

$$det(\mathcal{A}) = det\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_V^2 - \epsilon + U_0 & U_1 & U_1 \\ U_1 & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{`})^2 - \epsilon + U_0 & U_1 \\ U_1 & U_1 & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{`})^2 - \epsilon + U_0 \end{pmatrix}$$

dobimo tri rešitve, vendar sta dve od teh konjugirano kompleksni. Zato se reševanja lotimo malce drugače: v tej splošni matriki zamenjamo (ϵ) z $(\epsilon_I + \Delta\epsilon)$, kajti nas zanima tenzor efektivne elektronske mase v maksimumu elektronskega pasu z najnižjo energijo. Torej vzamemo pas z najnižjo energijo v vogalu, ki sem ga v 2.1.2 zapisala kot $\epsilon_I = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}_V^{0\,2} + U_0 + 2U_1$, okoli katerega razvijemo ϵ iz matrike: torej $\epsilon = \epsilon_I + \Delta\epsilon$. Prav tako moramo razviti $\vec{k}_V$ okoli $\vec{k}_V^0 = \frac{b_2}{2}(1,0,0)$ oz. $\vec{k}_V = \vec{k}_V^0 + \Delta\vec{k}_V$. Torej je potrebno izračunati še $\vec{k}_V^2$, $(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{`})^2$, $(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{`})^2$.

Označila sem:
$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m}$
$\epsilon = \epsilon_0 + U_0 + 2U_1 + \Delta\epsilon$, kjer je le $\Delta\epsilon$ nekonstanta
$\epsilon_0 = \alpha\vec{k}_V^{0\,2}$
$\epsilon_k = \alpha\vec{k}_V^2$
$\epsilon_{K_1} = \alpha(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{`})^2$
$\epsilon_{K_2} = \alpha(\vec{k}_V - \vec{K}_2^{`})^2$, kjer sta $\vec{K}_1^{`}$, $\vec{K}_2^{`}$ iz naloge 2.1.2,

na novo zapisala determinanto z razvito energijo:

$$det(\mathcal{A}) = \begin{vmatrix} \epsilon_k + U_0 - \epsilon_0 - U_0 - 2U_1 - \Delta\epsilon & U_1 & U_1 \\ U_1 & \epsilon_{K_1} + U_0 - \epsilon_0 - U_0 - 2U_1 - \Delta\epsilon & U_1 \\ U_1 & U_1 & \epsilon_{K_2} + U_0 - \epsilon_0 - U_0 - 2U_1 - \Delta\epsilon \end{vmatrix} =$$

$$= \begin{vmatrix} \epsilon_k - \epsilon_0 - 2U_1 - \Delta\epsilon & U_1 & U_1 \\ U_1 & \epsilon_{K_1} - \epsilon_0 - 2U_1 - \Delta\epsilon & U_1 \\ U_1 & U_1 & \epsilon_{K_2} - \epsilon_0 - 2U_1 - \Delta\epsilon \end{vmatrix}$$

Označila sem še $\mathcal{K} = \epsilon_0 + 2U_1 + \Delta\epsilon$ ter zapisala determinanto:

$$det\mathcal{A} = (\epsilon_k - \mathcal{K})(\epsilon_{K_1} - \mathcal{K})(\epsilon_{K_2} - \mathcal{K}) + 2U_1^3 - U_1^2(\epsilon_k + \epsilon_{K_1} + \epsilon_{K_2} - 3\mathcal{K}) = 0$$

Na tem mestu sem rekla:
$\vec{k}_V = \vec{k}_V^0 + (\Delta k_x, \Delta k_y, 0) = (\frac{b_2}{\sqrt{3}} + \Delta k_x, \Delta k_y, 0)$
$\vec{k}_V - \vec{K}_1^{`} = (b_2\frac{2-\sqrt{3}}{2\sqrt{3}} + \Delta k_x, -\frac{b_2}{2} + \Delta k_y, 0)$

$\vec{k}_V - \vec{K}_2^{'} = (b_2 \frac{2-\sqrt{3}}{2\sqrt{3}} + \Delta k_x, \frac{b_2}{2} + \Delta k_y, 0)$

$\vec{k}_V^2 = \frac{b_2^2}{3} + \frac{b_2}{\sqrt{3}} \Delta k_x + \Delta k_x^2 + \Delta k_y^2$
$(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'})^2 = b_2^2 \frac{13-4\sqrt{3}}{12} + b_2 (\frac{2-\sqrt{3}}{\sqrt{3}} \Delta k_x - \Delta k_y) + \Delta k_x^2 + \Delta k_y^2$
$(\vec{k}_V - \vec{K}_1^{'})^2 = b_2^2 \frac{13-4\sqrt{3}}{12} + b_2 (\frac{2-\sqrt{3}}{\sqrt{3}} \Delta k_x + \Delta k_y) + \Delta k_x^2 + \Delta k_y^2$

Vse te izraze sem vstavila v zgornji polinom ter nato zanemarila vse člene, ki so vsebovali $\Delta\epsilon^2$ ter še njene višje rede (ohranila sem le $\Delta\epsilon$). Iz tako zapisanega polinoma sem izrazila $\Delta\epsilon$ v odvisnosti od Δk_x ter Δk_y.

Lahko zapišem:
$\epsilon = konst. + \Delta\epsilon(\Delta k_x, \Delta k_x)$
$k_{x,y} = konst. + \Delta k_{x,y}$
$d\epsilon = 0 + d(\Delta\epsilon)$
$dk_{x,y} = 0 + d(\Delta k_{x,y})$
$\frac{\partial\epsilon}{\partial k} = \frac{\partial(\Delta\epsilon)}{\partial(\Delta k)}$
Torej tenzor efektivne elektronske mase lahko izračunam kot:

$$m^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \Delta\epsilon}{\partial \Delta k_x^2} & \frac{\partial^2 \Delta\epsilon}{\partial \Delta k_x \partial \Delta k_y} \\ \frac{\partial^2 \Delta\epsilon}{\partial \Delta k_x \partial \Delta k_y} & \frac{\partial^2 \Delta\epsilon}{\partial \Delta k_y^2} \end{pmatrix}.$$

Ko sem poračunala te odvode (z Mathematica-o) ter vstavila vrednosti za vse konstante, sem dobila:

$$m^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} -1,66110^{-37} \frac{1}{kg} & 0 \\ 0 & 1,17810^{-38} \frac{1}{kg} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -1,50710^{31} \frac{1}{kg} & 0 \\ 0 & 1,06910^{30} \frac{1}{kg} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{m} \begin{pmatrix} -13,73 & 0 \\ 0 & 0,973 \end{pmatrix}.$$

Slednje je izraženo z maso elektrona (m). če pa zapišemo še samo maso (m^1):

$$m^1 = \begin{pmatrix} -0,073 & 0 \\ 0 & 1,03 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -6,6210^{32} & 0 \\ 0 & 9,3510^{31} \end{pmatrix}.$$