

CHAPITRE 5. Carbon Structures

Exercices

I. LIENS

1. **Hybridization** Dériver la forme d'hybridation sp^2 : c'est à dire la relation entre les états $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ et les états hybrides.
2. **Principe de Variation** En utilisant le principe de variation, calculez l'état plus bas d'un atome d'hélium avec la fonction $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\alpha^2}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)}$. Quel est le résultat dans le premier ordre de la théorie de perturbation (avec l'interaction électron-électron comme perturbation)? Quelle est l'énergie d'ionisation dans chaque cas? (Notez que la partie de la fonction d'onde pour le spin donne l'antisymétrie.)
3. **Tight-binding.** Calculer l'intégrale de "overlap" pour les états $2s$ à $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ et $2s$ à $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{x}}$.
4. **Tight-binding.** Calculer l'intégrale de "overlap" pour les états $2p_x$ à $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ et $2p_x$ à $\mathbf{r} = \frac{r}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}})$.

II. GRAPHENE

5. **Vecteur de Translation** Si le vecteur de translation est écrit comme $t_1\mathbf{a}_1 + t_2\mathbf{a}_2$, et si les coefficients sont fixés par la condition $\mathbf{C}_h \cdot \mathbf{T} = 0$, où $\mathbf{C}_h = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$, prouver que $t_1 = \frac{2m+n}{\gcd(2m+n, 2m+n)}$, $t_2 = \frac{2n+m}{\gcd(2m+n, 2m+n)}$.
6. **Taille de l'unité cellulaire** Prover que le nombre d'hexagones par unité cellulaire est: $N = \frac{2|\mathbf{C}_h|^2}{a^2 \gcd(2m+n, 2n+m)}$.
7. **Propriétés de la structure de Graphene** Demontrez les éléments de la table suivant sauf celles marquées avec (*):

TABLE I: Propriétés de la structure de Graphene

	zigzag	armchair	chiral
\mathbf{C}_h	$(n, 0)(*)$	$(n, n)(*)$	$(n, m)(*)$
\mathbf{T}	$(1, -2)$	$(1, -1)$	$(\frac{2m+n}{d_R}, -\frac{2n+m}{d_R})(*)$
\mathbf{R}	$(1, -1)$	$(1, 0)$	
L/a	n	$\sqrt{3}n$	$\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$
T	$\sqrt{3}$	1	$\sqrt{3}L/d_R$
N. de hexagones	$2n$	$2n$	$2L^2/(a^2 d_R)$