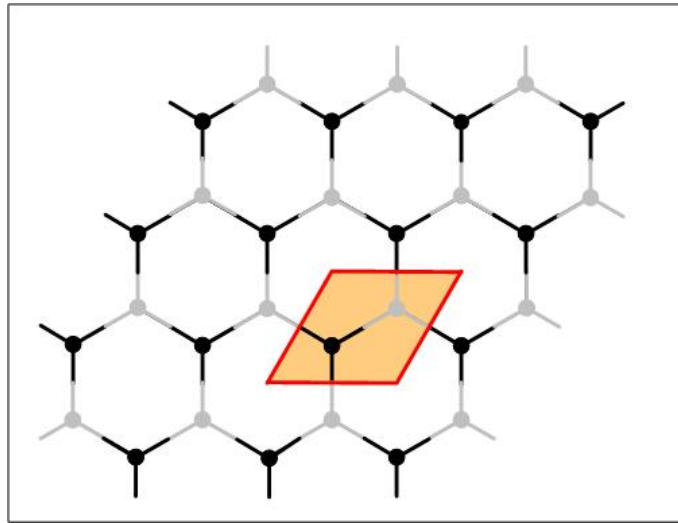


محاسبه پاشندگی انرژی با استفاده از روش تنگ بست

۱. برای شبکه‌های سه بعدی  $fcc$  و  $bcc$ ، با فرض اینکه هر اتم فقط یک اوربیتال نوع  $s$  داشته باشد رابطه پاشندگی انرژی را بدست آورید. انرژی جهش (هایپینگ) بین همسایه‌های اول را برابر با  $-t$  در نظر بگیرید.
۲. یک شبکه دو بعدی شش‌گوش مطابق شکل زیر، از دو نوع اتم مختلف در هر یاخته واحد تشکیل شده است. برای هر اتم فقط یک اوربیتال  $p_z$  (راستای  $z$  عمود بر صفحه است) در نظر گرفته و انرژی جایگاهی دو نوع اتم را  $\epsilon_A$  و  $\epsilon_B$  و انرژی جهش بین همسایه‌های اول را برابر  $-t$  فرض کنید. نوارهای انرژی این شبکه را در تقریب بستگی قوی بدست آورید.



۳. یک نردبان اتمی بی‌نهایت، از اتمهای کاملاً یکسان مطابق شکل زیر تشکیل شده است. الف) با فرض یک اوربیتال  $s$  بر هر اتم، ساختار نواری نردبان را در تقریب تنگ-بست بدست بیاورید. طول تمامی پیوندها  $a$ ، جهش بین نزدیکترین همسایه‌ها در طول زنجیر  $-t$  و بین دو اتم مجاور از دو زنجیر  $-t'$  است. ب) نتایج خود را برای حالت‌های  $t \gg t'$  و  $t \ll t'$  بررسی و تحلیل کنید. سعی کنید ارتباطی منطقی بین نتایج حاصل از محاسبات خود با آنچه که از قبل میدانید (یا از لحاظ شهودی انتظار دارید) برقرار کنید.

