Física del Estado Sólido

Guía 4 - 21 de abril de 2023

Problema 1. *Tight binding con un solo orbital*

Considere una cadena monoatómica unidimensional con parámetro a, en la que solo intervienen orbitales (atómicos) s.

a) A partir de las simetrías de los orbitales s, demuestre que los elementos de matriz $\langle \phi_s(x)| \hat{H} |\phi_s(x-ma)\rangle$ con $m \neq 0$ resultan negativos.

b) Exprese adecuadamente los elementos de la base $\chi_{k,s}(x)$. ¿Cuántos sumandos intervienen en la expansión para las soluciones $\psi_{nk}(x)$? Encuentre la relación de dispersión $\varepsilon(k)$.

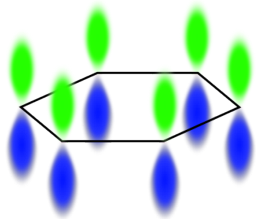
Analice ahora el caso en que únicamente intervienen orbitales p.

c) Realice un análisis similar al anterior para demostrar que los elementos de matriz $\langle \phi_p(x)| \hat{H} |\phi_p(x-ma)\rangle$ con $m \neq 0$ resultan positivos.

d) Construya los elementos de la base $\chi_{k,p}(x)$ y encuentre la relación de dispersión $\varepsilon(k)$.

Problema 2. *Condiciones de contorno de Born-von Karman*

El benceno es una molécula cíclica cuya fórmula es C_6H_6. Las posiciones de equilibrio de cada átomo de carbono están ubicadas en las esquinas de un hexágono regular (plano x-y). Considere sólo los orbitales p_z representados en la figura, interactuando con la energía de enlace $-V_{pp\pi} < 0$. El objetivo es determinar la estructura electrónica. Utilizando el teorema de Bloch y condiciones periódicas de contorno encuentre los vectores de onda k permitidos, las autoenergías $\varepsilon(k)$ y los orbitales moleculares resultantes.



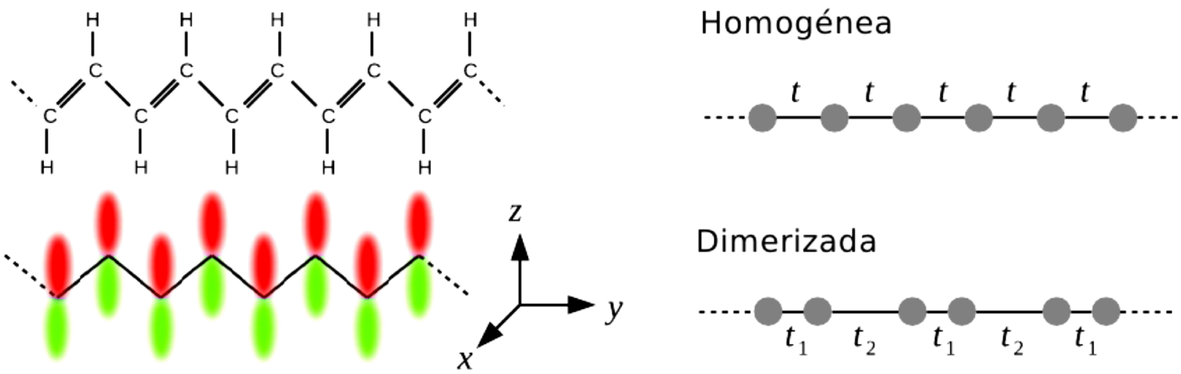
Esquema de la estructura hexagonal del benceno y los orbitales p_z de los carbonos.

Problema 3. *Teorema de Bloch en modelos tight-binding o LCAO en 1D*

Considere un electrón en un molécula lineal formada por una larga cadena de átomos con espaciamiento de red a donde cada átomo contribuye con un electrón (esta situación aproxima el polímero poliacetileno $(CH)_N$ con $N \gg 1$). Una base posible es la de los orbitales atómicos (orbitales p_z), donde el estado $|n\rangle$ representa el orbital del n-ésimo átomo, y se supone una relación de ortogonalidad $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$. Cualquier estado $|\phi\rangle$ del "cristal unidimensional" puede ser escrito como

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \, .$$

La energía de ionización de cualquier orbital particular es $\langle n|\hat{H}|n\rangle \equiv E_o$, mientras que la interacción de enlace es $\langle n| \hat{H} |n \pm 1\rangle \equiv -t = -t_{pp\pi} < 0$.



Izquierda: estructura del poliacetileno y orbitales p_z. Derecha: esquemas del hamiltoniano tight-binding asociado a los orbitales p_z para el caso de la cadena homogénea y de la cadena dimerizada con hoppings alternados $t_1 > t_2$ (inciso **b**).

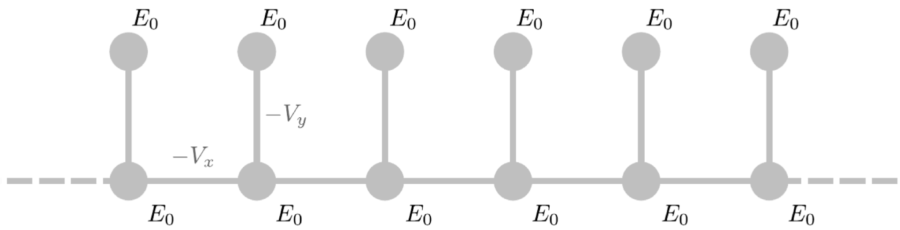
a) Escriba el hamiltoniano electrónico en forma matricial. Usando el teorema de Bloch, encuentre una expresión para la energía $\varepsilon(k)$ en función de k, donde $\hbar k$ es el cuasi-momento de la partícula. Grafique $\varepsilon(k)$, identificando la banda de energías permitidas y las regiones de energías prohibidas.

b) Resulta que en vez de la configuración considerada en **a)** la naturaleza favorece el estado dimerizado (transición de Peierls). Este consiste en que las distancias entre los átomos de carbono están alternadas en dos valores. Modele el hamiltoniano asociado a esta red y determine el espectro de energías permitidas.

c) Teniendo en cuenta que cada átomo de carbono contribuye con un electrón en el orbital p_z, calcule la energía de Fermi para las cadenas de los incisos **a)** y **b)**. ¿Qué diferencia puede notar en los dos casos?

Problema 4. *Peine*

Considere la red de sitios tipo "peine" utilizando tight-binding



con $V_y, V_x > 0$.

a) Considere el caso $V_y \equiv 0$. Grafique cómo serán las bandas sin encontrar la relación de dispersión. Indique cómo se modificarán si $V_y \gtrapprox 0$.

b) Considere el caso $V_x \equiv 0$. Grafique cómo serán las bandas sin encontrar la relación de dispersión. Indique cómo se modificarán si $V_x \gtrapprox 0$.

c) Encuentre la relación de dispersión tight-binding y controle que, en los límites propuestos anteriormente, son los esperados.

Problema 5. *Grafeno*

El grafeno es actualmente uno de los materiales más estudiados desde su producción en el 2004 por el grupo de Andre Geim. Este material consiste en una lámina de un átomo de espesor, constituida por átomos de carbono que forman una red tipo 'panal de abejas'. Para calcular la estructura de bandas de este material se proponen estos pasos:

a) Tomando una base de dos átomos de carbono por celda primitiva, determine la red de Bravais asociada al grafeno.

b) Calcule los vectores primitivos de la red recíproca y construya la primera zona de Brillouin.

c) Utilizando la aproximación tight-binding más simple (considere un único orbital atómico por carbono y sólo acoples entre primeros vecinos dado por $\gamma_o = -2{,}7$ eV), derive en forma analítica la estructura de bandas $\varepsilon(\boldsymbol{k})$ y grafique.

d) Encuentre las coordenadas de los puntos K donde $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = 0$.

e) Muestre que, en la aproximación de bajas energías $\varepsilon \ll \gamma_o$, la densidad de estados es lineal en energía. Expanda $\varepsilon(\boldsymbol{k})$ alrededor de un punto K y muestre que es un cono. ¿Qué tiene de *relativista* este resultado?