Problemas de tight binding

Ricardo Mendes Ribeiro

8 de Abril de 2022

Tight binding

1. Considere uma cadeia unidimensional de N átomos (com condições periódicas), separados de a, em que cada átomo tem um estado electrónico, que se designa por $|n\rangle$.

   Determine a curva de dispersão deste sistema.

2. Determine a curva de dispersão do sistema do problema anterior mas considerando também saltos de segundos vizinhos.

3. Considere uma rede quadrada, de lado a, com um átomo em cada ponto da rede, e cada átomo só tem um estado. Os vectores da rede são:

   $$\boldsymbol{R} = na\boldsymbol{e}_x + ma\boldsymbol{e}_y \tag{1}$$

   e os estados são designados por $|nm\rangle$.

   Determine a curva de dispersão deste sistema.

4. Considere uma rede diatómica unidimensional, em que os átomos alternam, a distâncias iguais. A célula primitiva contém dois átomos diferentes, e tem dimensão a. Designamos os dois tipos de átomos da célula n por A_n e B_n.

   Determine a curva de dispersão deste sistema.

5. Considere uma cadeia unidimensional de átomos distanciados de a e em que cada átomo tem dois estados, α e α'. Os estados designam-se por $|n\alpha\rangle$ e $n\alpha'\rangle$. O parâmetro de salto para o mesmo estado no átomo ao lado é t, para outro estado dentro do mesmo átomo é t_α e para outro estado noutro átomo é t' (salto diagonal).

   Determine a curva de dispersão deste sistema.

6. Considere uma folha de grafeno, em que os átomos são todos de carbono, e a rede é descrita pelos vectores da rede:

   $$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}\boldsymbol{e}_x + \frac{\sqrt{3}a}{2}\boldsymbol{e}_y$$
   $$\boldsymbol{a}_2 = -\frac{a}{2}\boldsymbol{e}_x + \frac{\sqrt{3}a}{2}\boldsymbol{e}_y$$

e temos dois átomos na base, nas posições:

$$(0,0,0); \qquad \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0\right)$$

em coordenadas dos vectores da rede, ou

$$(0,0,0); \qquad \left(0, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right)$$

em coordenadas cartesianas.

O parâmetro de hopping t é igual para os três possíveis saltos.

(a) Determine a curva de dispersão deste sistema.

(b) Determine os vectores da rede recíproca, e desenhe a primeira zona de Brillouin.

(c) Calcule a curva de dispersão em torno de uma das esquinas da primeira zona de Brillouin, um dos chamados pontos K.

7. Considere uma cadeia de átomos unidimensional espaçados de a e com um defeito no átomo $n = 0$, que se manifesta por ter uma energia local diferente dos outros átomos, E_0 relativamente à energia local dos outros atomos. O parâmetro de hopping é igual para todos.

   (a) Determine a probabilidade de transmissão de um electrão que se propaga na direção do defeito.

   (b) Determine os estados ligados do defeito.