Tarea 7

1.
Mostrar que con las definiciones

$$
\begin{aligned}
g_1 &\equiv \frac{1}{4}\left[e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(1)}} + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(2)}} + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(3)}} + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(4)}}\right]\\
g_2 &\equiv \frac{1}{4}\left[e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(1)}} + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(2)}} - e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(3)}} - e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(4)}}\right]\\
g_3 &\equiv \frac{1}{4}\left[e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(1)}} - e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(2)}} + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(3)}} - e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(4)}}\right]\\
g_4 &\equiv \frac{1}{4}\left[e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(1)}} - e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(2)}} - e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(3)}} + e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{AB}^{(4)}}\right]
\end{aligned}
$$

y

$$
\begin{aligned}
V_{ss} &= 4V_{ss\sigma}\\
V_{sp} &= 4V_{sp\sigma}\big/\sqrt{3}\\
V_{xx} &= \left(4V_{pp\sigma}\big/3\right)+\left(8V_{pp\pi}\big/3\right)\\
V_{xy} &= \left(4V_{pp\sigma}\big/3\right)-\left(4V_{pp\pi}\big/3\right)
\end{aligned}
$$

el hamiltoniano de tight binding para un material con la estructura del diamante puede escribirse

$$
H = \begin{bmatrix}
\varepsilon_s & 0 & 0 & 0 & V_{ss}g_1 & V_{sp}g_2 & V_{sp}g_3 & V_{sp}g_4\\
0 & \varepsilon_p & 0 & 0 & -V_{sp}g_2 & V_{xx}g_1 & V_{xy}g_4 & V_{xy}g_3\\
0 & 0 & \varepsilon_p & 0 & -V_{sp}g_3 & V_{xy}g_4 & V_{xx}g_1 & V_{xy}g_2\\
0 & 0 & 0 & \varepsilon_p & -V_{sp}g_4 & V_{xy}g_3 & V_{xy}g_2 & V_{xx}g_1\\
V_{ss}g_1^* & -V_{sp}g_2^* & -V_{sp}g_3^* & -V_{sp}g_4^* & \varepsilon_s & 0 & 0 & 0\\
V_{sp}g_2^* & V_{xx}g_1^* & V_{xy}g_4^* & V_{xy}g_3^* & 0 & \varepsilon_p & 0 & 0\\
V_{sp}g_3^* & V_{xy}g_4^* & V_{xx}g_1^* & V_{xy}g_2^* & 0 & 0 & \varepsilon_p & 0\\
V_{sp}g_4^* & V_{xy}g_3^* & V_{xy}g_2^* & V_{xx}g_1^* & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_p
\end{bmatrix}
$$

2. A pesar de que el hamiltoniano del punto anterior es de tamaño 8×8, en muchos casos puede diagonalizarse en bloques de 2×2, que a su vez pueden diagonalizarse analíticamente. Consideremos por ejemplo la dirección Δ, para la cual el vector de onda de la function de Bloch está dado por $\boldsymbol{k} = \left(2\pi/a\right)\left(\delta,0,0\right)$, donde δ varía entre 0 (punto Γ) y 1 (punto *X*).

a) Mostrar que el hamiltoniano de tight binding se reduce a

$$
\begin{bmatrix}
\varepsilon_s & 0 & 0 & 0 & V_{ss}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & iV_{sp}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & 0 & 0\\
0 & \varepsilon_p & 0 & 0 & -iV_{sp}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & V_{xx}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & 0 & 0\\
0 & 0 & \varepsilon_p & 0 & 0 & 0 & V_{xx}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & iV_{xy}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right)\\
0 & 0 & 0 & \varepsilon_p & 0 & 0 & iV_{xy}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & V_{xx}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right)\\
V_{ss}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & iV_{sp}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & 0 & 0 & \varepsilon_s & 0 & 0 & 0\\
-iV_{sp}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & V_{xx}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_p & 0 & 0\\
0 & 0 & V_{xx}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & -iV_{xy}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & 0 & 0 & \varepsilon_p & 0\\
0 & 0 & -iV_{xy}\sin\left(k_x \frac{a}{4}\right) & V_{xx}\cos\left(k_x \frac{a}{4}\right) & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_p
\end{bmatrix}
$$

b) El hamiltoniano anterior contiene dos bloques de 4×4, como puede verse claramanente reordenando las funciones de base en la sequencia

$$\left|s_A\right\rangle \quad \left|p_{xA}\right\rangle \quad \left|s_B\right\rangle \quad \left|p_{xB}\right\rangle \quad \left|p_{yA}\right\rangle \quad \left|p_{yB}\right\rangle \quad \left|p_{zA}\right\rangle \quad \left|p_{zB}\right\rangle \quad .$$

Demostrar que se obtienen 4 bloques de 2×2 si elegimos las funciones de base

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|s_A\right\rangle + \left|s_B\right\rangle\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|p_{xA}\right\rangle + \left|p_{xB}\right\rangle\right); \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|s_A\right\rangle - \left|s_B\right\rangle\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|p_{xA}\right\rangle - \left|s_{xB}\right\rangle\right),$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|p_{yA}\right\rangle + \left|p_{yB}\right\rangle\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|p_{yA}\right\rangle - \left|p_{yB}\right\rangle\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|p_{zA}\right\rangle + \left|p_{zB}\right\rangle\right), \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|p_{zA}\right\rangle - \left|p_{zB}\right\rangle\right)$$

c) Diagonalizar los bloques de 2×2 y demostrar que las energías están dadas por

$$E = \frac{\left[\varepsilon_s + \varepsilon_p + \left(V_{ss} + V_{xx}\right)\cos\frac{\pi}{2}\delta\right] \pm \sqrt{\left[\left(\varepsilon_s - \varepsilon_p\right) + \left(V_{ss} - V_{xx}\right)\cos\frac{\pi}{2}\delta\right]^2 + 4V_{sp}^2 \sin\frac{\pi}{2}\delta}}{2}$$

$$E = \frac{\left[\varepsilon_s + \varepsilon_p - \left(V_{ss} + V_{xx}\right)\cos\frac{\pi}{2}\delta\right] \pm \sqrt{\left[\left(\varepsilon_s - \varepsilon_p\right) - \left(V_{ss} - V_{xx}\right)\cos\frac{\pi}{2}\delta\right]^2 + 4V_{sp}^2 \sin\frac{\pi}{2}\delta}}{2}$$

$$E = \varepsilon_p \pm \sqrt{V_{xx}^2 \cos^2\frac{\pi}{2}\delta + V_{xy}^2 \sin^2\frac{\pi}{2}\delta}$$

3. Calcular la dispersión de celda vacía para la estructura del diamante en la dirección Δ, utilizando los vectores de la red recíproca $\frac{2\pi}{a}\left(l,m,n\right)$, con $\left(l,m,n\right) =$

$$\left(0,0,0\right),\left(1,1,1\right),\left(1,\bar{1},1\right),\left(1,1,\bar{1}\right),\left(1,\bar{1},\bar{1}\right),\left(\bar{1},1,1\right),\left(\bar{1},\bar{1},1\right),\left(\bar{1},1,\bar{1}\right),\left(\bar{1},\bar{1},\bar{1}\right)\left(2,0,0\right),\left(0,2,0\right),\left(0,0,2\right),\left(\bar{2},0,0\right),\left(0,\bar{2},0\right),\left(0,0,\bar{2}\right)$$

4. Ajustar los parámetros $V_{ss}, V_{sp}, V_{xx}, V_{xy}$ del modelo tight binding igualando las siguientes energías:

a) La diferencia entre los dos niveles *s* en el punto Γ con la diferencia entre el segundo y el primer nivel más bajo en energía en el mismo punto de la celda vacía. (el primer nivel es 0, de modo que sólo necesitamos la enrgía del segundo nivel)

b) La diferencia entre los dos niveles *p* en el punto Γ con la diferencia entre el tercer y el segundo nivel más bajos en el mismo punto de la celda vacía.

c) La diferencia entre los autovalores de la solución enlazante de character *p* puro (la tercera ecuación en 2c, con el signo menos) con la diferencia entre el segundo nivel en el punto Γ en la celda vacía y el segundo nivel en el punto X en la celda vacía.

d) La differencia entre el punto *X* y el punto Γ para la banda de más baja energía.

5. Demostrar que si escribimos $V_{ll'm} = \eta_{ll'm}\hbar^2/md^2$, los resultados del Problema 4 implican

$\eta_{ss\sigma}$	$\eta_{sp\sigma}$	$\eta_{pp\sigma}$	$\eta_{pp\pi}$
$9\pi^2/64$	$3\sqrt{15}\pi^2/64$	$21\pi^2/64$	$-3\pi^2/32$