

## ESTUDO DO ESPECTRO TIGHT BINDING EM CADEIAS DIAMANTE E ABC

Éric Carvalho Rocha, José Pimentel de Lima (Orientador, Departamento de Física – UFPI)

### Introdução

O modelo simplificado de íons imóveis na rede é bem sucedido em várias aplicações da física do estado sólido como, por exemplo, para explicar o comportamento dos elétrons de condução. Neste trabalho objetivou-se estudar inicialmente o espectro de modos normais de cadeias tipo massa-mola, clássicas e, em seguida, o modelo quântico tight-binding sobre diversos tipos de cadeia, especialmente os casos diamante e ABC.

### Metodologia

A metodologia usada está disponível na literatura principalmente em textos de estado sólido, física básica e mecânica quântica como: Goldstein [1], Cohen-Tannoudji [2], Charles Kittel [3], e Ashcroft [4]. Inicialmente foi revisado e aprofundado o estudo em álgebra linear, especialmente sobre propriedades dos operadores lineares e suas representações. Paralelamente foram manuseados pacotes numéricos em FORTRAN, disponíveis no repositório [5].

### Resultados e Discussão

Inicialmente foram resolvidas cadeias massa mola com periodicidades relativas às células. Em seguida foram resolvidos sistemas fracamente desordenados para cadeias massa mola aleatórias, fazendo a constante de força  $k=k(1+r)$ , onde  $r$  é um valor aleatório entre 0 e 1. Foi considerado também o sistema aleatório binário de duas massas acopladas aos pares onde se pode observar que todos os auto-estados são exponencialmente localizados (Figura 1).

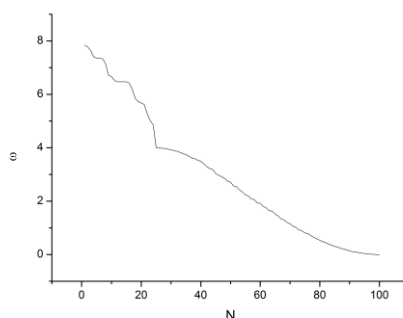


Figura 1 Auto-frequências para um sistema massa-mola aleatórias tipo AA-BB

No modelo tight-binding, assumimos que na vizinhança de cada ponto da rede, o Hamiltoniano periódico pode ser aproximado por um  $H_{at}$  de um único átomo localizado no ponto da rede então fazemos uma combinação linear dos orbitais localizados nos vários sítios da rede. O Hamiltoniano tight-binding considerado para a cadeia linear com interação para os primeiros vizinhos:

$$H|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = H_0|\psi_n\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-1}\rangle\langle\psi_n|$$

Pelo qual se obteve para a relação ilustrada na figura 2 para uma célula com periodicidade cinco.

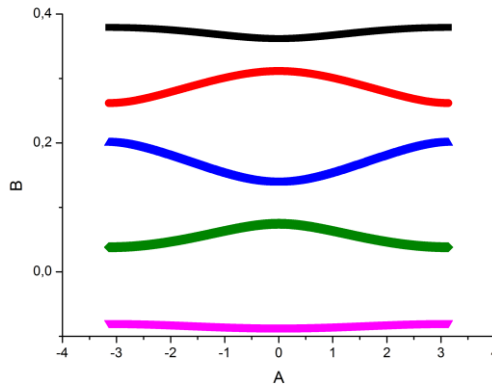


Figura 2 Relação de dispersão para uma cadeia periódica com cinco sítios por células

Estudou-se o espectro aproximado das cadeias diamante e ABC. Para a cadeia diamante unidimensional:

$$\begin{aligned}
 H|\psi_n\rangle\langle\psi_n| &= \mathbf{H}_0|\psi_n\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-2}\rangle\langle\psi_n| \\
 H|\psi_{n2}\rangle\langle\psi_{n2}| &= \mathbf{H}_0|\psi_{n2+1}\rangle\langle\psi_{n2}| - t|\psi_{n2+2}\rangle\langle\psi_{n2}| - t|\psi_{n2-1}\rangle\langle\psi_{n2}| - t|\psi_{n2-2}\rangle\langle\psi_{n2}| \\
 H|\psi_{n3}\rangle\langle\psi_{n3}| &= \mathbf{H}_0|\psi_{n3}\rangle\langle\psi_{n3}| - t|\psi_{n3+2}\rangle\langle\psi_{n3}| - t|\psi_{n3-1}\rangle\langle\psi_{n3}|
 \end{aligned}$$

E o Hamiltoniano da cadeia tipo escada:

$$\begin{aligned}
 H|\psi_n\rangle\langle\psi_n| &= \mathbf{H}_0|\psi_n\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-2}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-3}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n| \\
 H|\psi_n\rangle\langle\psi_n| &= \mathbf{H}_0|\psi_n\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n+2}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-3}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n+1}\rangle\langle\psi_n| \\
 H|\psi_n\rangle\langle\psi_n| &= \mathbf{H}_0|\psi_n\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-4}\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_n\rangle\langle\psi_n| - t|\psi_{n-1}\rangle\langle\psi_n|
 \end{aligned}$$

Relacionou-se algebricamente as resoluções do modelo clássico massa mola com o modelo quântico *tight-binding* sobre cadeias unidimensionais. A equivalência entre os sistemas massa mola e *tight-binding* para uma cadeia homogênea na presença de impurezas pode ser obtida pelo seguinte mapeamento:

$$2 - m_p\omega^2 \rightarrow E \qquad (m_i - m_p)\omega^2 \rightarrow \mathcal{E}_i \qquad \mathcal{K} \rightarrow V$$

#### Conclusão

O problema clássico de vibração em uma dimensão possui semelhança estreita com o problema de um elétron propagando-se em uma cadeia de *tight-binding*. Existe um único ponto de diferença entre uma onda clássica em uma cadeia massa-mola e um elétron quântico que é quando o vetor de onda é zero. Nessas condições a onda tem a mesma amplitude em todo lugar é uma translação uniforme de uma configuração clássica, sem força de restauração, ou seja, autovalores nulos. Não há analogia ao problema de propagação do elétron. Nos sistemas desordenados, todos os auto-estados serão exponencialmente localizados e não será observado transporte de longo alcance.

#### Referências

- [1] Goldstein, Classical mechanics, 2002.
- [2] COHEN-TANNOUDJI, Quantum Mechanics, 2005.
- [3] CHARLES KITTEL, Introdução a física do estado sólido, 2006.

[4] ASHCROFT NEIL W, Física do estado sólido, 2011.

[5] [www.netlib.org](http://www.netlib.org)

**Palavras-chave:** modelo tight-binding.espectro de cadeias periódicas