Lista de Exercícios VII

1. (baseado no problema 9.9, Kittel) **Funções de Wannier.** As funções de Wannier de uma banda são definidas em termos das funções de Bloch da mesma banda através das equações

$$\omega(\vec{r}-\vec{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

onde $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ é a função de Bloch do cristal.
(a) Prove que as funções de Wannier para diferentes pontos da rede são ortogonais:

$$\int \mathrm{d}\vec{r}\omega^*(\vec{r}-\vec{R}_n)\omega(\vec{r}-\vec{R}_m) = \delta_{nm}$$

Esta propriedade de ortogonalidade faz com que estas funções muitas vezes sejam mais úteis que orbitais atômicos associados a diferentes pontos da rede, já que os últimos em geral não são ortogonais.
(b) As funções de Wannier possuem picos nas posições dos pontos da rede. Mostre que para um gás de elétrons livres em uma dimensão, $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikx}$, a função de Wannier é,

$$\omega(x-x_n) = \frac{\sin \pi(x-x_n)/a}{\pi(x-x_n)/a}$$

onde N é o número de átomos da rede e a o parâmetro da rede.
Para uma discussão mais detalhada das funções de Wannier, ver A. Haug, **Theoretical Solid State Physics**, vol. 1, cap. II-6, Pergamon Press.

2. **Superfície de Fermi.** Considere uma rede cúbica simples, com parâmetro de rede a. Assuma que cada átomo tem dois elétrons no último orbital. Calcule a superfície de Fermi e discuta em termos de ocupação das zonas de Brillouin.

3. **Rede quadrada - elétron fortemente ligado.** Considere uma rede quadrada bidimensional (direções x e y) com parâmetro de rede a. Considere os orbitais p_x e p_y, que podem ser escritos na forma $\phi_{p_x}(\vec{r}) = x\phi(r)$ e $\phi_{p_y}(\vec{r}) = y\phi(r)$, onde $\phi(r)$ tem simetria esférica (depende apenas do módulo de $\vec{r}$). (a) Calcule a dispersão das bandas de energia para esses orbitais levando em consideração apenas os primeiros vizinhos. (b) Faça um esquema da banda incluindo a dispersão nas direções ao longo de uma aresta ($\Gamma - M$) e ao longo da diagonal do quadrado ($\Gamma - X$) e unindo esses dois pontos ($M - X$) (ou seja, $\varepsilon \times X - \Gamma - M - X$). (c) Discuta o que aconteceria se você incluísse a interação com os segundos vizinhos.
Obs.: não calcule nenhuma integral. Deixe indicado como nas notas de aula.