

**(1) (3 puntos)** Calcula y dibuja la estructura de bandas,  $E(k)$ , para una cadena de átomos A y B en zig-zag (ver Figura 1) con un orbital  $s$  en cada átomo ( $\phi_A$ ,  $\phi_B$ ), mediante el método *tight-binding*. Si los átomos A y B son  $Na$  y  $Mg$ , determina el valor del nivel de Fermi,  $\varepsilon_F$ . En este caso, ¿la cadena será metálica o aislante? Explica las respuestas. Parámetros TB:  $e_A = \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_1) | H | \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_1) \rangle = 0$ ;  $e_B = \langle \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_2) | H | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_2) \rangle = -3.0$  eV;  $V_{ss} = \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_1) | H | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_2) \rangle = -1.0$  eV ( $\mathbf{R}_1$  y  $\mathbf{R}_2$  primeros vecinos).

**(2) (3 puntos)** Considera una cadena lineal monoatómica a lo largo del eje X. La distancia entre átomos es  $a$  y la masa de los átomos es  $M$ . Los átomos se mueven en el plano XY. (1) Dibuja esquemáticamente y argumenta cómo será su espectro vibracional (relación de dispersión  $w(\mathbf{q})$  de sus fonones). (2) La energía potencial se puede escribir como:

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_{n,m} (D_{nm}^{xx} x_n x_m + D_{nm}^{yy} y_n y_m)$$

donde  $x_n \equiv u_{n,x}$ ,  $y_n \equiv u_{n,y}$  son los desplazamientos respecto de la posición de equilibrio según los ejes X, Y. Escribe  $E_p$  en la aproximación de interacciones a primeros vecinos en función únicamente de los parámetros  $C$  y  $B$ , siendo estos  $C = D_{n,n+1}^{xx}$  y  $B = D_{n,n+1}^{yy}$ . (3) Calcula  $w(\mathbf{q})$  usando esta expresión de  $E_p$ .

**(3) (2 puntos)** Considera electrones en dos dimensiones moviéndose en un potencial periódico débil descrito por

$$V(x, y) = \sum_{n,m} A_{n,m} e^{i\frac{2\pi}{a}(nx+my)}; |A_{n,m}| \ll \frac{(\hbar\pi)^2}{ma^2}$$

Calcula los dos niveles de energía más bajos,  $\varepsilon(\mathbf{k})$ , para  $\mathbf{k} = \left(\frac{\pi}{4a}, \frac{\pi}{a}\right)$ .

**(4) (2 puntos)** Un cristal ficticio de átomos de  $Si$  forma una red de Bravais monoatómica con densidad  $\rho = 1730$  kg/m<sup>3</sup>. Determina el área por átomo,  $A$ , en los planos de átomos perpendiculares al vector de la red recíproca  $\mathbf{G} = m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3$ , donde  $m_1 = 8$ ,  $m_2 = 2$ ,  $m_3 = 6$  y  $\mathbf{g}_1 = c \mathbf{u}_x$ ,  $\mathbf{g}_2 = c \mathbf{u}_y$ ,  $\mathbf{g}_3 = c \mathbf{u}_z$  ( $c = 2\pi/3 \text{ \AA}^{-1}$ ) son los vectores primitivos de la red recíproca.

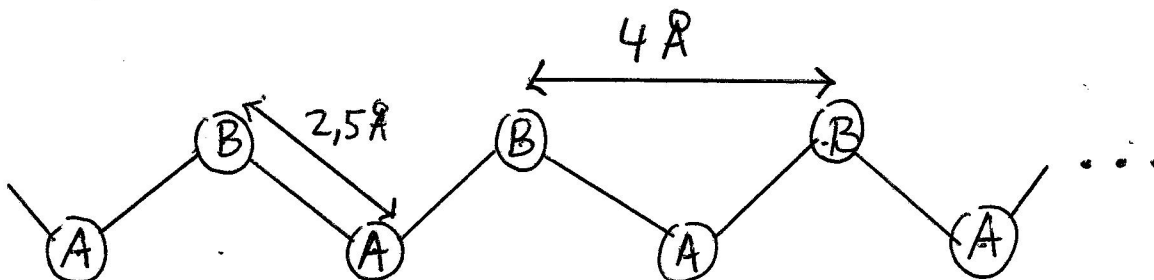


FIGURA 1