

Titolo della tesi:

Hamiltoniane *tight-binding* e funzioni di Wannier massimamente localizzate

Relatore: Giulio Pettini (pettini@fi.infn.it)

Candidato: Alkis Papanastassiou

Scopo della tesi è mostrare come sistemi Hamiltoniani continui e non interagenti, caratterizzati da un potenziale periodico, possano essere trattati passando dalla relativa Hamiltoniana continua (di singola particella) ad una Hamiltoniana discreta, o Hamiltoniana *tight-binding*, i cui parametri possono essere convenientemente calcolati utilizzando la base delle funzioni di Wannier massimamente localizzate (MLWFs) introdotte da Marzari e Vanderbilt ¹. In particolare, quando le buche del potenziale periodico sono sufficientemente profonde, il troncamento dello sviluppo sulla base degli stati di Wannier diventa uno sviluppo perturbativo (sviluppo *tight-binding*). L'approssimazione di sistemi non interagenti è ben giustificabile se si considerano atomi ultrafreddi intrappolati in reticoli ottici, sistemi caratterizzati dalla possibilità di controllare con grande precisione sia la geometria che le interazioni tra particelle, con queste ultime che possono perciò essere rese arbitrariamente piccole. Lo studio di sistemi come i suddetti ha avuto un grande sviluppo in anni recenti, vista la loro utilità nel simulare una gran varietà di fenomeni in fisica della materia condensata.

Nella parte iniziale della tesi, dopo aver richiamato le principali caratteristiche dei sistemi periodici governati dall'equazione di Schrödinger, vengono definite le basi ortonormali e complete degli stati di Wannier di banda singola e composta (stati di Wannier generalizzati). L'ortonormalità e la completezza ne permettono l'utilizzo come basi per lo sviluppo *tight-binding*. Viene inoltre mostrato che tali stati, essendo ottenuti da una trasformazione sul quasi-momento \mathbf{k} degli stati di Bloch (banda singola) o di un loro mescolamento unitario (banda composta), possiedono una libertà di definizione data, nel primo caso, dalla possibilità di moltiplicare gli stati di Bloch per un fattore di fase dipendente dal quasi-momento (il gruppo di *gauge* è quindi $U(1)$), nel secondo caso dalle possibili scelte delle matrici unitarie del mescolamento (perciò, se N sono gli stati che vengono combinati, il gruppo di *gauge* è $U(N)$). Sono stati quindi riassunti gli aspetti principali del metodo di Marzari e Vanderbilt che consiste nel determinare la *gauge* nella quale lo *spread* $\Omega = \sum_n [\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2]$ su stati di Wannier è minimo. Questo procedimento definisce la *gauge* delle MLWFs.

Nella tesi è stata riassunta la procedura per il calcolo della Hamiltoniana *tight-binding* ed è stato mostrato esplicitamente che il calcolo dello spettro dipende dalla *gauge* solo se si utilizzano funzioni di Wannier generalizzate, queste ultime necessarie nel caso si studino un gruppo di bande energetiche ben separato dalle altre. In particolare l'energia di una singola banda, calcolata a un ordine finito dello sviluppo sulla base delle MLWFs di banda composta, viene a dipendere dalla *gauge* scelta.

Nella parte finale della tesi sono riassunte due applicazioni studiate in letteratura, nelle quali, pur in assenza di una dimostrazione formale, si fa l'ipotesi che la *gauge* delle MLWFs sia quella che fornisce la migliore approssimazione *tight-binding* dello spettro. Il primo esempio riguarda un potenziale periodico unidimensionale con una doppia buca per cella unitaria mentre la seconda applicazione è il potenziale bidimensionale con geometria a nido d'ape. Questi esempi avvalorano l'ipotesi fatta, mostrando come il modello *tight-binding*, quando viene basato sulle MLWFs, sia in grado di riprodurre gli spettri di singola particella con grande accuratezza.

¹N. Marzari, D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, 12847 (1997).