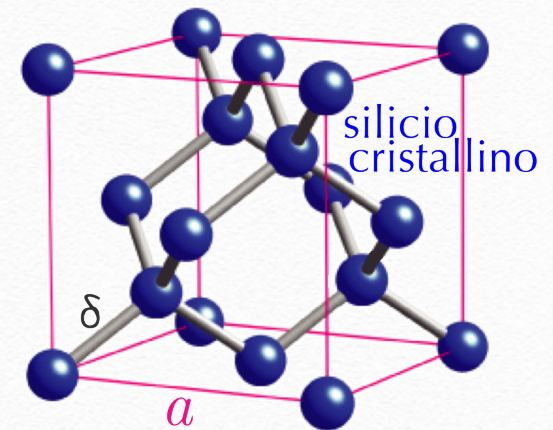


# onde piane vs. ioni puntiformi

una base di  $N_{pw}$  onde piane  $|\mathbf{k}+\mathbf{G}\rangle$  è la scelta piú comoda e naturale per sviluppare nello spazio di Hilbert gli stati elettronici di un cristallo periodico; finché però abbiamo fra i piedi potenziali  $-Z/r$  che divergono nell'origine e legano stati (di core e di valenza) che hanno forti oscillazioni spaziali vicino a  $r=0$  (nucleo), non possiamo usarla:

- ▶ l'estensione spaziale dello stato di core piú basso di tutti è  $\lambda_{1s} \approx 1/Z \ll \delta \leq a$  (qui  $\delta$  è una tipica distanza fra atomi primi vicini e  $a$  un tipico parametro reticolare; in figura l'esempio del silicio solido)
- ▶ vicino al nucleo tutti gli stati  $n_s$  con  $n > 1$  (core e valenza), ortogonali allo stato  $1s$ , hanno oscillazioni spaziali di lunghezza d'onda  $\lambda_{1s} \approx 1/Z$ ; per rappresentarli vanno perciò incluse tutte le onde piane con  $|\mathbf{k}+\mathbf{G}| < \mathbf{G}_{cut} \propto 2\pi / \lambda_{1s}$
- ▶ sono diversi milioni : 
$$N_{pw} \approx \left( \frac{4}{3} \pi \mathbf{G}_{cut}^3 \right) / \left( \frac{2\pi}{a} \right)^3 = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{a}{\lambda_{1s}} \right)^3$$
- ▶ lo sforzo computazionale per diagonalizzare una matrice  $N_{pw} \times N_{pw}$  è proporzionale a  $N_{pw}^3$  (se interessano soltanto gli stati piú bassi in energia, è proporzionale "soltanto" a  $N_{pw}^2$ : sempre troppo)
- ▶ il grosso di questo sforzo, anche se fattibile, andrebbe comunque "sprecato" nel rappresentare gli stati di core e valenza vicino al nucleo, cioè nella regione meno coinvolta dal legame chimico
- ▶ per molte proprietà dei solidi (coesione, vibrazioni, transizioni ottiche, conducibilità elettrica etc) il core è praticamente congelato: alla fine il suo (enorme) contributo si cancella, e sopravvive solo quello (piccolo) degli stati di valenza



$$\lambda_{1s} \approx \delta/60 \approx a/140$$

**domanda: è possibile liberarsi del core? come?**