

Guía 4: Métodos de cálculo de estructura electrónica (Enlaces Fuertes)

1. TIGHT BINDING EN UNA DIMENSION

Considere una cadena lineal de átomos iguales separados por una distancia a . El hamiltoniano del sistema está caracterizado por términos diagonales ε y no diagonales entre primeros vecinos t .

- i) Encuentre la estructura de bandas (considerando un solo orbital tipo s por sitio).
- ii) Calcule la densidad de estados.
- iii) Si hay un electrón por sitio, calcule el nivel de Fermi.
- iv) Estime cualitativamente que ocurriría al aplicar presión

2. TIGHT BINDING UNIDIMENSIONAL CON BASE

Considere una cadena lineal de átomos alternados tipo A y B y con energías de sitio ε_A y ε_B respectivamente. El término de salto t es distinto de cero sólo entre primeros vecinos. Repita los puntos **i)**, **ii)** y **iii)** del problema anterior.

3. TIGHT BINDING EN TRES DIMENSIONES

Encuentre las bandas de energía por el método tight-binding en un sólido de estructura cúbica simple. Suponga que cada sitio aporta un único orbital de tipo s con energía ε , e interacción con los primeros vecinos t . Calcule la masa efectiva a lo largo de toda la banda. Grafique las curvas de dispersión a lo largo del siguiente recorrido: $\Gamma \rightarrow X \rightarrow K \rightarrow \Gamma \rightarrow W \rightarrow K$, donde $\Gamma = (0, 0, 0)$; $X = (k, 0, 0)$; $K = (k, k, 0)$ y $W = (k, k, k)$, con $k = \pi/a$.

Repita el cálculo para una red FCC.

4. Encuentre las bandas de energía por el método *tight binding* en un sólido de estructura BCC. Suponga que cada sitio aporta un único orbital tipo s con energía de sitio ε , la interacción con los primeros vecinos es $-t$ y con los segundos vecinos $-\gamma$. Grafique las curvas de dispersión a lo largo del siguiente recorrido: $\Gamma \rightarrow H \rightarrow N \rightarrow P \rightarrow \Gamma$, donde $\Gamma = (0, 0, 0)$; $H = (0, 2k, 0)$; $N = (k, k, 0)$ y $P = (k, k, k)$, con $k = \pi/a$.

5. Se tiene una cadena unidimensional en la que los electrones se pueden considerar fuertemente ligados, con dos orbitales por sitio, uno tipo s y otro tipo p , de energías de sitio ε_s y ε_p , respectivamente. Los parámetros de “salto” son t_{ps} entre orbitales p y s del mismo sitio, y $-t_s(t_p)$ entre orbitales $s(p)$ de sitios primeros vecinos.

- i) Escriba el hamiltoniano en el espacio real.
- ii) ¿Cómo es la relación de dispersión si $t_s = t_p = 0$? Grafique la densidad de estados.
- iii) ¿Cómo es la relación de dispersión si $t_s \neq t_p \neq 0$? Ubique el nivel de Fermi si cada átomo aporta dos electrones s y uno p .
- iv) Suponga $t_{sp} = 0$ y t_s y t_p “chicos” (¿con respecto a qué?). Grafique cualitativamente la densidad de estados.

6. Considere una bicapa de una red FCC de parámetro a , a lo largo de la dirección (100). Suponiendo que la interacción es sólo entre primeros vecinos y que cada átomo aporta un electrón s , halle la energía por el método de electrones fuertemente ligados.

Si $\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ es la función de Bloch de vector de onda \mathbf{k} (perteneciente a la primer zona de Brillouin) e índice de banda n , entonces se define la función de Wannier como:

$$\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$$

Demuestre que dos funciones de Wannier centradas en diferentes sitios o con diferentes índices de banda n son ortogonales. Pruebe que las funciones de Wannier están normalizadas si las funciones de Bloch lo están (o sea son ortonormales).