

## 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  $\varepsilon$  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  $\varepsilon_A$  y  $\varepsilon_B$  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  $\varepsilon$ , 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  $\varepsilon$ , 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  $\varepsilon_s$  y  $\varepsilon_p$ , 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).