

## ESTRUCTURA DE LA MATERIA 2

### PRIMER CUATRIMESTRE DE 2021

#### 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  $\epsilon$  y no diagonales entre primeros vecinos  $t$ .

- Encuentre la estructura de bandas (considerando un solo orbital tipo  $s$  por sitio).
- Calcule la densidad de estados.
- Si hay un electrón por sitio, calcule el nivel de Fermi.
- 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  $\epsilon_A$  y  $\epsilon_B$  respectivamente. El término de salto  $t$  es distinto de cero sólo entre primeros vecinos. Repita los primeros tres puntos 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  $\epsilon$ , 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  $\epsilon$ , 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  $\epsilon_s$  y  $\epsilon_p$ , 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.

- Escriba el hamiltoniano en el espacio real.
- ¿Cómo es la relación de dispersión si  $t_s = t_p = 0$ ? Grafique la densidad de estados.
- ¿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  $p$ .

- d) 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.
7. FUNCIONES DE WANNIER

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).