

---

## ESTRUCTURA DE LA MATERIA 2

### SEGUNDO CUATRIMESTRE DE 2024

#### GUÍA 4. MÉTODOS DE CÁLCULO DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA: EL MÉTODO DE ENLACES FUERTES (TIGHT BINDING)

##### 1. Tight binding en una dimensión.

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  $t$ .

- Encuentre la estructura de bandas (considerando un solo orbital tipo  $s$  por sitio).
- Calcule y grafique la densidad de estados.
- Determine el nivel de Fermi si hubiera un electrón por sitio.
- Estime cualitativamente qué ocurriría al aplicar presión a lo largo de la cadena lineal.

##### 2. Tight binding en en una dimensión, con base.

Considere una cadena lineal de átomos alternados del tipo  $A$  y  $B$  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 (a)-(c) del problema anterior.

##### 3. Tight binding en dos dimensiones: red cuadrada.

Considere una red monoatómica cuadrada de parámetro de red  $a$ . Se desea obtener las bandas de energía por el método de enlaces fuertes, suponiendo un único orbital de tipo  $s$ . Suponga que la energía de sitio es  $\varepsilon_s = 0$ , solo hay interacción a primeros vecinos de valor  $t$ , y desprecie el *overlap* entre orbitales.

- Obtenga la estructura de bandas y calcule su ancho. Grafíquela cualitativamente a lo largo del siguiente camino de alta simetría:  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ , con  $\Gamma = (0,0)$ ,  $X = (\frac{\pi}{a}, 0)$  y  $M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ .
- Si cada átomo aporta un electrón, ¿cuánto vale la energía de Fermi? Grafique la superficie de Fermi.
- Describa cualitativamente qué ocurre si existiera interacción a segundos vecinos.

##### 4. Tight binding en tres dimensiones: red SC.

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:  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow K \rightarrow \Gamma \rightarrow W \rightarrow M$ , donde  $\Gamma = (0,0,0)$ ;  $X = (k,0,0)$ ;  $M = (k,k,0)$  y  $W = (k,k,k)$ , con  $k = \pi/a$ .

Repita el cálculo para una red FCC.

##### 5. Tight binding en tres dimensiones: red BCC.

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  $k = \pi/a$ .

---

## 6. Tight binding unidimensional con orbitales $s$ y $p$ .

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.

- Escriba el hamiltoniano en el espacio real y en el recíproco.
- ¿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  $p$ .
- Suponga  $t_{sp} = 0$  y  $t_s$  y  $t_p$  “chicos” (¿con respecto a qué?). Grafique cualitativamente la densidad de estados.

## 7. Enlaces fuertes en una bicapa FCC.

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.

## 8. 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).