
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 ε 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 ε_A y ε_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 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: $\Gamma \rightarrow X \rightarrow K \rightarrow \Gamma \rightarrow W \rightarrow M$, 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 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 $k = \pi/a$.

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 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.

- 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).