

Guía 1 - Ejercicio 3

Enunciado. Calcular la densidad de estados de electrones en una red tipo cúbica/cuadrada resuelta con el modelo de tight-binding en 3D, 2D y 1D.

El Hamiltoniano del modelo de tight-binding, para el caso particular en que nos retringimos a una única banda, tiene la siguiente forma,

$$H_{TB} = \sum_{\mathbf{R}, \delta} t |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R} + \delta| + \sum_{\mathbf{R}} U |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}|,$$

en donde los kets $|\mathbf{R}\rangle$ representan estados centrados en cada sitio \mathbf{R} de la red, y δ hace referencia al conjunto de vectores que apunta desde \mathbf{R} hacia sus vecinos inmediatos. Los parámetros de este modelo son,

$$t = \langle \mathbf{R}| H_{TB} |\mathbf{R} + \delta\rangle,$$

el término de *hopping*, que corresponde a la amplitud de probabilidad de que un electrón “salte” del sitio \mathbf{R} de la red a su vecino inmediato $\mathbf{R} + \delta$, y

$$U = \langle \mathbf{R}| H_{TB} |\mathbf{R}\rangle,$$

llamado “energía de sitio”, que describe la energía de colocar un electrón en el sitio \mathbf{R} de la red.

La relación de dispersión para este modelo es,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = U + t \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} \quad (1)$$

Para el caso particular de una red cúbica de dimensión d se tiene,

$$\delta = \pm a \hat{e}_i, \quad ,$$

con $i = 1, \dots, d$ y a el factor de red. La relación de dispersión resulta,

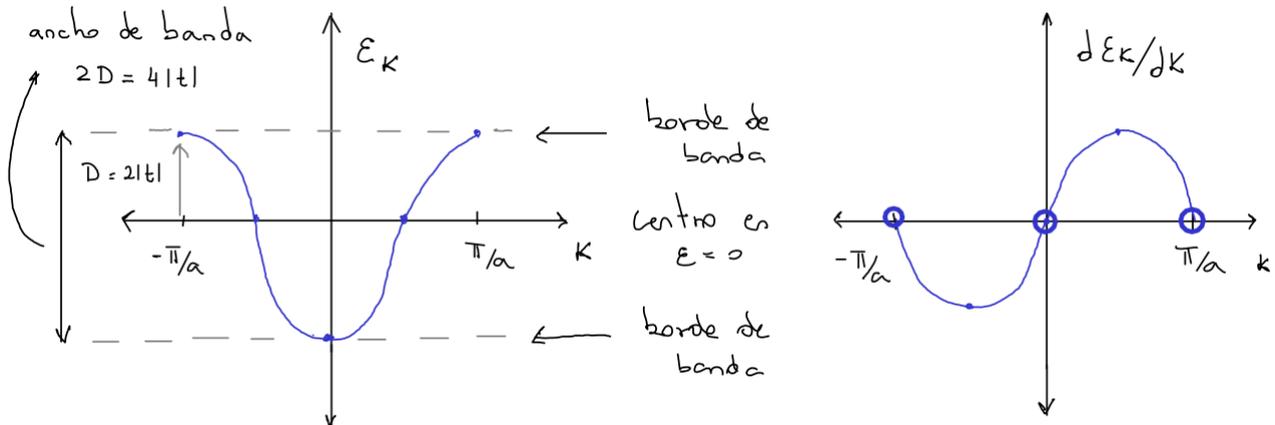
$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}} &= U + t \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} = U + t \sum_{i=1}^d [e^{ik_i a} + e^{ik_i(-a)}] = \\ &= U + 2t \sum_{i=1}^d \cos(k_i a). \end{aligned} \quad (2)$$

En el enunciado nos piden hallar la densidad de estados para $d = 1, 2$ y 3 .

Comencemos con el caso unidimensional, para el cual,

$$\varepsilon_k = -2t \cos(ka),$$

en donde, sin pérdida de generalidad hemos tomado $U = 0$ y hemos cambiado el signo de t (que en general es negativo). Si graficamos la relación de dispersión y su derivada, obtenemos



en donde vemos que la derivada es nula en los bordes de la banda, es decir, para $k = 0, \pm \frac{\pi}{a}$. Como la densidad de estados es inversamente proporcional a la pendiente de ε_k , esta resultará divergente en los bordes de banda (Singularidades de Van Hove).

Calculemos la densidad de estados para el caso unidimensional, para esto vamos a usar que,

$$g(\varepsilon) = \frac{dn}{d\varepsilon},$$

con n la densidad volumétrica de electrones. En el ejercicio hecho por Federico y Estefanía vimos que para $d = 1$,

$$n^{d=1} = \frac{2k}{\pi}.$$

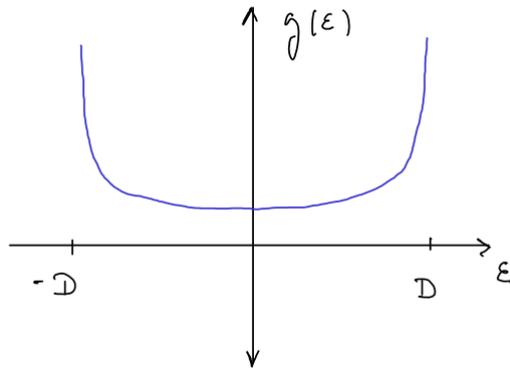
De la relación de dispersión tenemos que,

$$k = \frac{1}{a} \arccos \left[-\frac{\varepsilon}{2t} \right],$$

derivando respecto de ε , obtenemos,

$$g^{d=1}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{1}{a} \cdot \frac{-1}{\sqrt{1 - \left(-\frac{\varepsilon}{2t}\right)^2}} \cdot \left(-\frac{1}{2t}\right) = \frac{2}{\pi a D} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{D}\right)^2}},$$

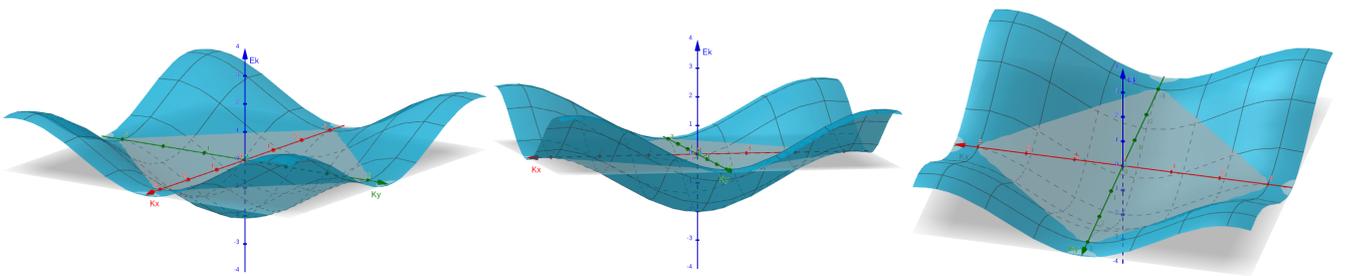
con $D = 2t$ (el semiancho de banda). Aquí vemos que la misma diverge para $\varepsilon = \pm D$, es decir, en los bordes de banda tal como habíamos previsto.



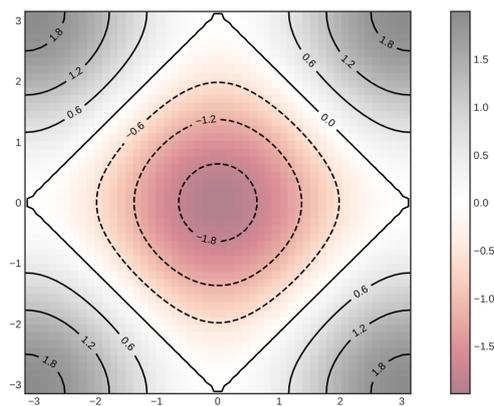
En el caso bidimensional,

$$\varepsilon_k = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)],$$

cuyo gráfico tiene la siguiente forma para $t = 0.5$ y $a = 1$,



siendo el gráfico de sus curvas de nivel el siguiente,



Aquí vemos que las cuatro esquinas del cuadrado correspondiente a la curva de nivel para $\varepsilon = 0$, son puntos silla, es decir puntos donde el gradiente es el vector nulo. Estos puntos darán lugar a una singularidad de Van Hove en el centro de la banda.

En este caso la densidad de estados estará dada por,

$$g^{d=2}(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{\varepsilon=cte.} \frac{dl_\varepsilon}{|\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon|} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{\varepsilon=cte.} \frac{dl_\varepsilon}{\frac{D}{2}a \left| \sqrt{\sum_{i=1}^2 \sin^2(k_i a)} \right|},$$

en donde las integrales son sobre las curvas de nivel que se muestran arriba y D , el semiancho de banda, dado por $D = 4|t|$.

Para el caso $d = 3$ la relación de dispersión es,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

y la expresión de la densidad de estados es,

$$g^{d=3}(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\varepsilon=cte.} \frac{dS_\varepsilon}{|\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon|} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\varepsilon=cte.} \frac{dS_\varepsilon}{\frac{D}{3}a \left| \sqrt{\sum_{i=1}^3 \sin^2(k_i a)} \right|}.$$

Estas integrales son difíciles de calcular de manera analítica, y normalmente se calculan de manera numérica. Aún así, podemos observar que para este modelo la relación de dispersión alcanza sus máximos y mínimos en los bordes de la banda. En estas regiones $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ varía lentamente y podemos hacer una expansión de Taylor. Dado que en estas regiones el gradiente se anula, en particular, alrededor de $\mathbf{k} = 0$ (borde inferior de la banda) tendremos,

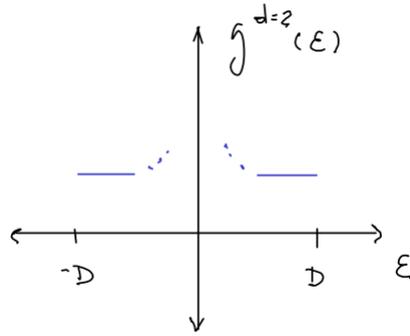
$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx -D + \frac{1}{2} \frac{D}{d} a^2 |\mathbf{k}|^2,$$

que va como el modulo del vector de onda al cuadrado. En los bordes de banda el comportamiento es análogo al del gas de electrones libres. Se pierde la dependencia con la estructura de la red, y la densidad de estados resultará solo dependiente solo de la dimensionalidad.

Los cálculos se simplifican porque las superficies/curvas de energía constante ahora son esféricas, y la energía solo depende del modulo de \mathbf{k} . Luego, para el caso bidimensional,

$$g^{d=2}(\varepsilon) \approx \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{\varepsilon=cte.} \frac{dl_\varepsilon}{\frac{D}{2}a^2 |\mathbf{k}|} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\varphi k \frac{1}{\frac{D}{2}a^2 k} = \frac{2}{\pi D a^2} = cte.$$

que es constante como era de esperar (igual que ocurre en el caso de electrones libres). El cálculo para el borde de banda superior es esencialmente el mismo.

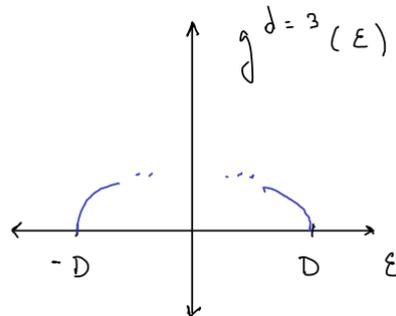


En el caso tridimensional,

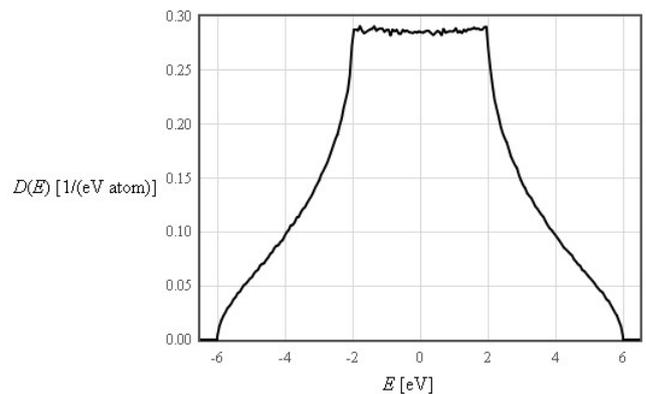
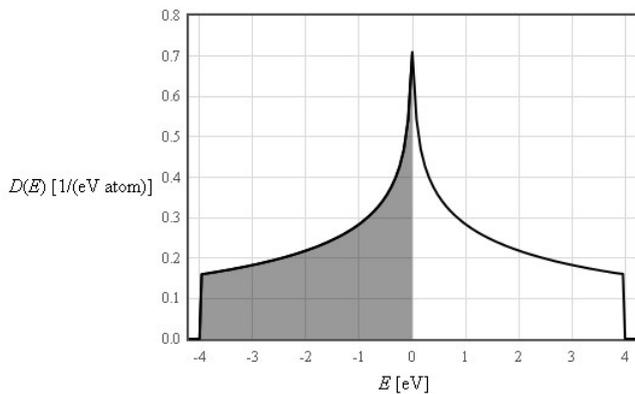
$$g^{d=3}(\varepsilon) \approx \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\varepsilon=cte.} \frac{dS_\varepsilon}{\frac{D}{3} a^2 |\mathbf{k}|} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^{4\pi} d\Omega k^2 \frac{1}{\frac{D}{3} a^2 k} =$$

$$= \frac{2}{2\pi^2} \frac{3}{D a^2} k \Big|_{k=\sqrt{6(E+D)/(D a^2)}} = \frac{\sqrt{54}}{\pi^2 D a^3} \sqrt{\left(\frac{E}{D} + 1\right)},$$

que al igual que en el caso de electrones libres va como \sqrt{E} .



Si observamos los gráficos de las densidades calculadas numéricamente, obtenidas para $t = 1$, vemos en ambos casos los comportamientos previstos¹.



¹<http://lampx.tugraz.at/~hadley/ss1/bands/tbtable/tbtable.html>