

MÉTODO ALGORÍTMICO PARA LA SIMULACIÓN DE ESTRUCTURAS DE BANDAS DE ENERGÍA EN REDES CÚBICAS

ALGORITHMIC METHOD FOR ENERGY BANDS STRUCTURE SIMULATION IN CUBIC LATTICES

Héctor Barco, Elisabeth Restrepo, Edilberto Rojas

Departamento de Física y Química, Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, Colombia

(Recibido: Marzo/2014. Aceptado: Mayo/2014)

Resumen

En este trabajo se implementó un modelo para el estudio de estructura de bandas de energía. Este modelo se basó en el método de diferencias finitas, usando un arreglo 3D. Inicialmente, la celda unitaria mallada emplea un paso h , con el fin de dividir la celda unitaria en partes más pequeñas. Cada punto de la malla se representó por medio de una función de onda. Se obtuvieron las derivadas aproximadas de cada punto en sus direcciones (x , y y z), empleando la diferencia entre los puntos vecinos a lo largo de los ejes. Las funciones de onda descritas por las funciones de Bloch, el laplaciano y las derivadas son incluidas en la ecuación de Schrödinger. Luego, se resuelve dicha ecuación con el fin de obtener los valores propios (las energías), graficadas en función del vector de onda, con el fin de construir las estructuras de bandas. Para estudiar su desempeño, este modelo fue aplicado a diferentes celdas cúbicas, como cubica simple, cubica centrada en el cuerpo (BCC) y cúbica centrada en las caras (FCC), con dimensiones unitarias.

Palabras clave: estructura de bandas, diferencias finitas, cúbica simple, BCC, FCC.

Abstract

In this work a model for studying energy band structures was implemented. The model is based on the finite differences method, using a 3D array. Initially, the unit cell is gridded with h as step, in order to divide the lattice in smaller parts. Each grid point was well-represent by a wavefunction. The derivative of each grid point is obtained approximately in each direction (x , y and z), carrying out the difference between the neighbor points along the axes. Wavefunctions described by the Bloch functions, the laplacian and the derivatives are included into the Schrödinger equation. Then, it is solved by numerical methods in order to obtain the eigenvalues (energies), plotted as a function of the wavevector for building the band structures. For studying its performance the model was applied to the different cubic cells as simple cubic, body centered cubic (BCC) and face centered cubic (FCC) lattices with unitary dimensions.

Keywords: band structures, finite differences, Simple cubic, BCC, FCC.

Introducción

La estructura de bandas es uno de los conceptos más importantes en la física del estado sólido. Esto se debe a que prácticamente todas las propiedades físicas de los materiales se pueden derivar a partir de la distribución de sus estados de energía. En realidad, cualquier estado de energía excitado (estado diferente al estado base) en un sólido cristalino, puede caracterizarse a partir de los vectores de Bloch k . Sin embargo, usualmente la estructura de bandas se refiere a la distribución de los niveles de energía electrónicos. La estructura electrónica determina los enlaces químicos que mantienen los átomos unidos dentro de un sólido. Por ejemplo, un material es conductor, semiconductor o aislante dependiendo de cómo es su estructura de bandas y de la localización del nivel de energía de Fermi con respecto al ancho de banda (band gap) o separación entre la banda de valencia y banda de conducción.

Además, la estructura electrónica indirectamente determina los niveles vibracionales, es decir, los fonones de determinado sólido; esta dependencia tiene que ver con que el radio atómico depende de la estructura electrónica y a su vez, las frecuencias (niveles vibracionales) también están bien correlacionadas con dicho radio atómico. Por lo tanto, las propiedades ópticas, eléctricas y magnéticas dependen fuertemente de la estructura de bandas, pero dependen aún más de la forma cómo interactúan los electrones dentro de un material [1, 2]. En la literatura se pueden encontrar diferentes métodos para el cálculo de la estructura de bandas de materiales; por ejemplo, Chelikowsky y sus colaboradores [3] presentaron un método para calcular estructuras de bandas basado en una combinación lineal de orbitales tipo atómico. Tsukamoto y sus colaboradores [4] determinaron la estructura de bandas complejas a partir de funciones de onda de Bloch generalizadas para obtener los estados enlazados de superficies y estructuras de uniones que no aparecen en análisis convencionales. En las pasadas dos décadas, existió un remarcable progreso en el cálculo exacto de la energía total de un sistema, empleando teoría del funcional de la densidad (density-functional theory) en la aproximación de densidad local (local-density approximation-DFT/LDA) [5, 6] y más recientemente en la aproximación del gradiente generalizado (generalized gradient approximation) [7, 8]. La teoría del funcional de la densidad nació a partir de un extraordinario documento presentado en 1964 por Hohenberg y Korn [5] y su método de implementación presentado en 1995. Posteriormente se han presentado diferentes revisiones como la realizada por Parr [9], en la que trata de presentar un resumen de la teoría DFT para sistemas de pocos electrones. En 2012, Cohen [10], presenta no solo un resumen de aspectos importantes en teoría DFT, sino también su ingreso a la química y los desafíos futuros en lo que tiene que ver con sus aplicaciones. Por otro lado, desde su formulación se han propuesto diferentes modificaciones. Por ejemplo, Fritsche y sus colaboradores [11–13] propusieron una corrección al método de teoría del funcional de densidad denominado teoría del funcional de la densidad generalizado (generalized density-functional theory -GDFT). Esto debido a que métodos como DFT están basados en

cálculos ab-initio y normalmente ellos consideran la energía total como una función únicamente de la densidad electrónica, siendo el potencial desconocido. Estos métodos han sido ampliamente empleados para calcular la estructura de bandas de materiales como diamante, entre otros [14]. La energía total debe considerarse como una suma de diferentes contribuciones como la energía cinética de los electrones, la interacciones ion-ion y ion-electrón, entre otras. Por el contrario, el método propuesto por E. Restrepo-Parra et al [15] es una técnica simple y fácil de implementar, que presenta resultados similares a los reportados en la literatura, con bajo costo computacional. En este método se propone un arreglo tridimensional de un potencial atractivo, simétrico y circularmente limitado (range-limited circularly symmetric attractive potential). La celda está dividida en partes más pequeñas que conservan el comportamiento de toda la red, y el potencial depende fuertemente de la interacción de Coulomb entre los iones de la red. Estos autores reportan un modelo para una red hexagonal; sin embargo es necesario llevar a cabo muchas modificaciones físicas y geométricas para aplicar este método a otras estructuras cristallinas como son las redes cúbica simple, cubica centrada en las caras (FCC) y cúbica centrada en el cuerpo (BCC). Para implementar este modelo, inicialmente se considera la aproximación del electrón libre, con un potencial igual a cero. Por otro lado, junto con el desarrollo del modelo, se presentan interfaces gráficas que permiten llevar a cabo simulaciones más intuitivas y mayor facilidad en el análisis de los datos. Las representaciones gráficas de las estructuras de los materiales y sus diferentes propiedades físicas son herramientas importantes para el modelamiento y la simulación de propiedades de la materia a escala atómica [16]. Desde hace algún tiempo la comunidad científica ha desarrollado estudios teóricos de diferentes propiedades físicas y químicas de la materia como son: enlaces químicos, estructura química, características mecánicas, magnéticas y eléctricas, entre otras. Sin embargo, existían limitaciones debido al poco desarrollo que tenían las herramientas computacionales [17–19]. Posteriormente, el fuerte crecimiento en los sistemas de cómputo y en su accesibilidad ha hecho del modelamiento y la simulación por diferentes métodos,

un área de interés en el campo de la física y la química de la ciencia e ingeniería de los materiales. Adicionalmente, el desarrollo de interfaces gráficas amigables con el usuario ha permitido el desarrollo de análisis computacionales de una forma más rápida y eficiente, llegando a convertirse en herramientas de gran valor.

En este trabajo se desarrollaron modelos para la obtención de estructura de bandas en redes cúbica simple, FCC y BCC empleando el método de diferencias finitas y se construyeron interfaces gráficas que permiten una interacción más amigable entre el software implementado y el usuario.

Fundamentos Teóricos

Cualquier estructura cristalina puede construirse a partir de reproducir una celda unitaria en el espacio tridimensional, empleando los vectores \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 , que presentan la periodicidad de la red. Las redes cristalinas poseen simetrías que las hacen muy interesantes y la colección de operaciones de simetría (incluyendo la traslación) que pueden ser empleadas para clasificar las redes. Posterior a la construcción de la red, es importante implementar modelos que reflejen la simetría de las redes y sus características. La implementación del modelo consiste en buscar una solución adecuada a la ecuación de Schrödinger [20]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1)$$

donde $\psi(\vec{r})$ es la función de onda, \hbar es la constante de Planck, m es la masa del electrón, $V(\vec{r})$ es el potencial tridimensional, E es la energía y \vec{r} es el vector en el espacio real. Una forma de resolver la Ec. (1) consiste en emplear las funciones de Bloch. Las funciones de Bloch se definen como el producto en una onda plana $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ (siendo \vec{k} el vector de onda) y una función dependiente de \vec{r} (coordenadas x , y , z), $u_k(\vec{r})$ que contiene la periodicidad de la red. Las funciones de Bloch se consideran como soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico y pueden escribirse como:

$$\psi(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2)$$

Estructura	Vectores Base
Cúbica Simple (CS)	$\vec{a}_1 = a\hat{x}; \vec{a}_2 = a\hat{y}; \vec{a}_3 = a\hat{z}$
Cúbica centrada en el cuerpo (BCC)	$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}); \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}); \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$
Cúbica centrada en las caras (FCC)	$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}); \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}); \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$

TABLA 1. Vectores base dependiendo de la geometría de la red.

Reemplazando (2) en (1) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 - \nabla^2 - 2i\vec{k} \cdot \nabla \right] u_k(x, y, z) + V(x, y, z)u_k(x, y, z) = Eu_k(x, y, z) \quad (3)$$

La red real en su estructura cúbica se construye empleando los vectores base \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 , que tienen una fuerte dependencia con la geometría de la red. La Tabla 1 presenta estos vectores. Siendo a , el parámetro de red de la celda cúbica, \hat{x} , \hat{y} y \hat{z} , los vectores unitarios en las direcciones de los ejes x , y , y z [21].

Implementación del Modelo

Estructura Cúbica Simple

La Figura. 1 muestra la estructura cúbica simple con su correspondiente mallado. El tamaño de la grilla es de $h=\frac{1}{4}$. Cada punto de la red se numera empleando condiciones de frontera periódicas. El modelo consiste en resolver la ecuación de Schrödinger normalizada llevando a cabo las derivadas de cada punto empleando diferencias finitas como se muestra en la Ec. (4).

$$\frac{1}{2} \left[k^2 - \nabla^2 - 2i\vec{k} \cdot \nabla \right] u_k(r) + V(r)u_k(r) = E_k u_k(r) \quad (4)$$

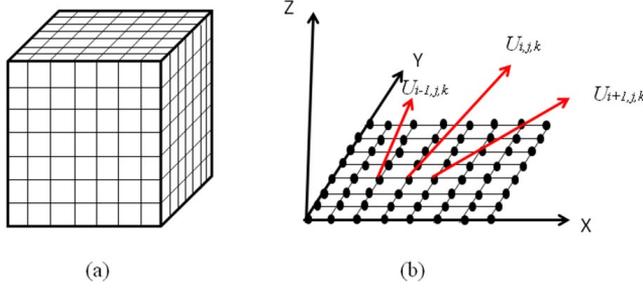


FIGURA 1. (a) Esquema de una red cúbica simple dividida en diferencias finitas y (b) identificación de puntos en el mallado por diferencias finitas.

Teniendo en cuenta la celda cúbica simple, se obtienen las siguientes expresiones, empleando el método de diferencias finitas:

$$\nabla_x = \frac{u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k}}{2h} \quad (5)$$

$$\nabla_y = \frac{u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k}}{2h} \quad (6)$$

$$\nabla_z = \frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}}{2h} \quad (7)$$

$$\nabla = \nabla_x + \nabla_y + \nabla_z$$

$$\nabla = \frac{1}{2h} [u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k} + u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k} + u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}] \quad (8)$$

$$\left. \begin{aligned} \nabla_x^2 &= \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i-1,j,k} - 2u_{i,j,k}}{4h^2} \\ \nabla_y^2 &= \frac{u_{i,j+1,k} + u_{i,j-1,k} - 2u_{i,j,k}}{4h^2} \\ \nabla_z^2 &= \frac{u_{i,j,k+1} + u_{i,j,k-1} - 2u_{i,j,k}}{4h^2} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{4h^2} [u_{i+1,j,k} + u_{i-1,j,k} + u_{i,j+1,k} + u_{i,j-1,k} + u_{i,j,k+1} + u_{i,j,k-1} - 6u_{i,j,k}] \quad (10)$$

Debido a que $u_{i,j,k}$ es una función periódica, esta se puede escribir como $u_{i,j,k} = e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$ siendo \vec{G} , los vectores de la red recíproca que

viene expresado como $\vec{G} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$, con m_1, m_2, m_3 enteros y \vec{b}_1, \vec{b}_2 y \vec{b}_3 sus vectores primitivos de la red recíproca y además se tiene en cuenta que el cambio del vector de onda, $\Delta\vec{k}$ es un vector \vec{G} de la red recíproca.

$$\left. \begin{aligned} u_{i-1,j,k} &= e^{-iG_x h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ u_{i+1,j,k} &= e^{iG_x h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ u_{i,j-1,k} &= e^{-iG_y h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ u_{i,j+1,k} &= e^{iG_y h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ u_{i,j,k-1} &= e^{-iG_z h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ u_{i,j,k+1} &= e^{iG_z h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Reemplazando (11) en (9) y (10) se obtienen las expresiones (12) y (13):

$$\left. \begin{aligned} \nabla_x &= \frac{e^{iG_x h} - e^{-iG_x h}}{2h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ \nabla_y &= \frac{e^{iG_y h} - e^{-iG_y h}}{2h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ \nabla_z &= \frac{e^{iG_z h} - e^{-iG_z h}}{2h} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

$$\left. \begin{aligned} \nabla &= \frac{1}{2h} \left[e^{iG_x h} - e^{-iG_x h} + e^{iG_y h} - e^{-iG_y h} + e^{iG_z h} - e^{-iG_z h} \right] e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \\ \nabla^2 &= \frac{1}{4h^2} \left[e^{iG_x h} - e^{-iG_x h} + e^{iG_y h} - e^{-iG_y h} + e^{iG_z h} - e^{-iG_z h} - 6 \right] e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}_{i,j,k}} \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Teniendo en cuenta la expresión de Euler $e^{i\theta} = \cos\theta + i\text{sen}\theta$ y reemplazando en (4) se obtiene:

$$E = \frac{1}{2} \left[\vec{k} \cdot \vec{k} - \frac{1}{2h^2} \{ \cos(G_x h) + \cos(G_y h) + \cos(G_z h) - 3 \} + \frac{2}{h} \{ k_x \text{sen}(G_x h) + k_y \text{sen}(G_y h) + k_z \text{sen}(G_z h) \} \right] + V(x, y, z) \quad (14)$$

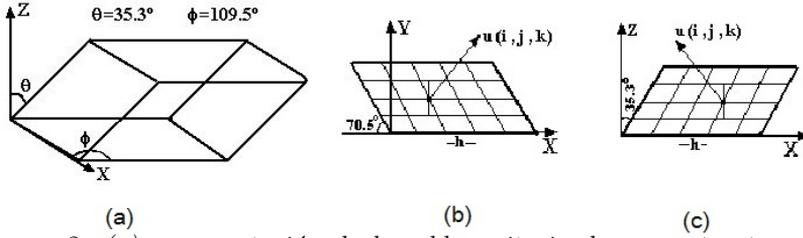


FIGURA 2. (a) representación de la celda unitaria de una estructura cúbica centrada en el cuerpo. (b) Esquema del mallado empleando diferencias finitas para el plano xy . (c) para el plano xz .

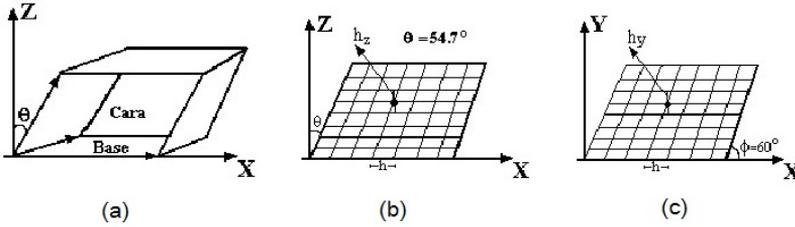


FIGURA 3. (a) representación de la celda unitaria de una estructura cúbica centrada en las caras [1]. (b) Esquema del mallado empleando diferencias finitas para el plano xy . (c) para el plano xz .

Estructura Cúbica Centrada en el Cuerpo

En la Figura 2 se muestra la celda unitaria y el método de diferencias finitas desarrollado para una red cristalina BCC.

El esquema de la celda unitaria para una estructura BCC se muestra en la Figura 2(a). Para la obtención del modelo de esta estructura se requiere llevar a cabo un desarrollo matemático similar al realizado para la estructura cúbica simple, como se muestra en las Figuras 2(b) y 2(c). A partir de estos análisis, se obtiene la siguiente expresión:

$$E = \frac{1}{2} \left[\vec{k} \cdot \vec{k} - \frac{1}{2h^2} \left\{ \cos(G_x h) + 1,125 \cos\left(G_y \frac{h}{2}\right) \cos(G_y h_y) + \right. \right. \\ \left. \left. 1,5 \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) \cos(G_z h_z) - 3,6254 \right\} + \frac{2}{h} \left\{ k_x \sin(G_x h) + 1,06 k_y \sin(G_y h_y) \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) + \right. \right. \\ \left. \left. 1,22 k_z \sin(G_z h_z) \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) \right\} \right] + V(x, y, z) \quad (15)$$

Donde $h_y = 1,88h$ y $h_z = 1,63h$.

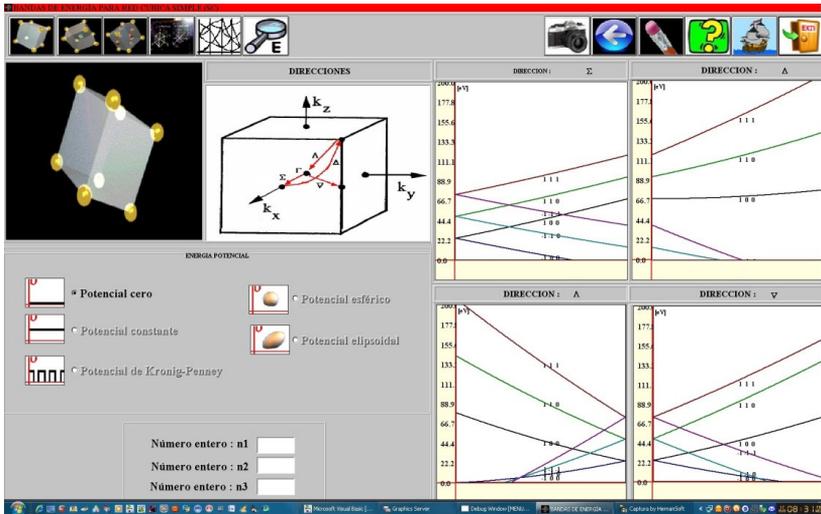


FIGURA 4. Interfaz gráfica empleada para la implementación del modelo de estructura de bandas de una red cubica simple (CS).

Estructura Cúbica Centrada en las Caras

Teniendo en cuenta la celda unitaria que se muestra en la Figura 3 y haciendo el mismo análisis de arriba.

Realizando el mismo análisis que se llevó a cabo para la estructura CS, se obtiene:

$$E = \frac{1}{2} \left[\vec{k} \cdot \vec{k} - \frac{1}{12h^2} \left\{ 6 \cos(G_x h) + 8 \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) \cos(G_y h_y) + 9 \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) \cos(G_z h_z) - 23 \right\} + \frac{1}{h} \left\{ 2k_x \sin(G_x h) + 2,3k_y \sin(G_y h_y) \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) + 2,45k_z \sin(G_z h_z) \cos\left(G_x \frac{h}{2}\right) \right\} \right] + V(x, y, z) \quad (16)$$

Donde $h_y = 1,73h$ y $h_z = 1,15h$.

Resultados y Discusión

Todas las simulaciones se llevaron a cabo para el caso de $V(x, y, z) = 0$, puesto que el objetivo principal del trabajo es probar el método para los casos de las redes cúbicas. Las gráficas de las estructuras de bandas llevadas a cabo representan tanto la

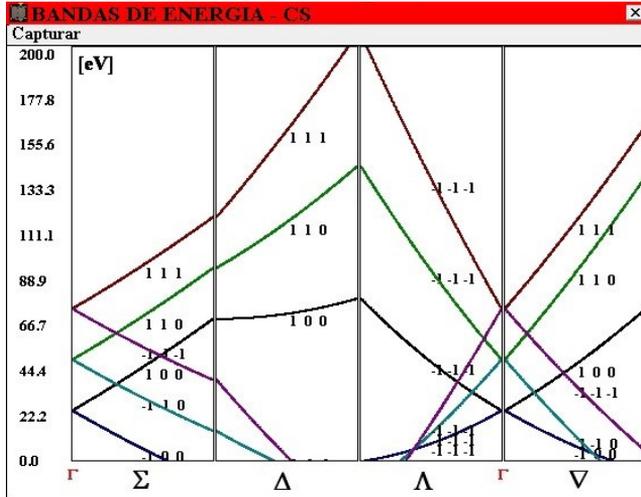


FIGURA 5. Resultados de la estructura de bandas de la red cúbica simple.

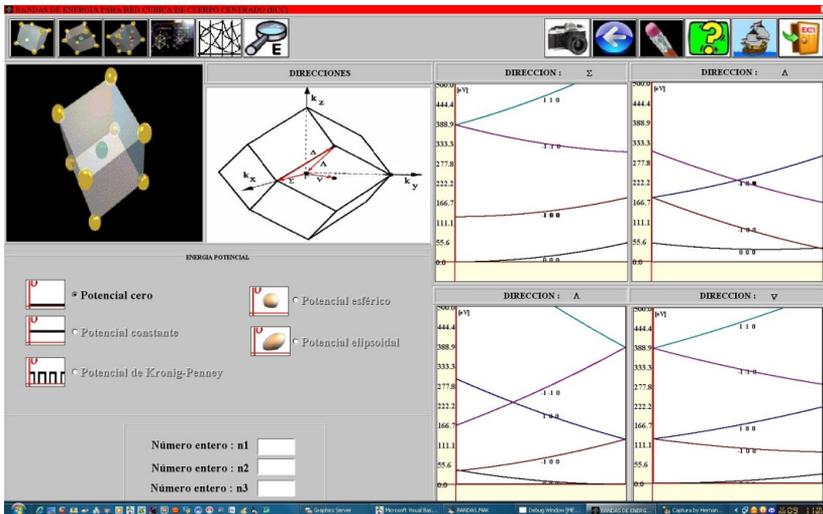


FIGURA 6. Interfaz gráfica empleada para la implementación del modelo de estructura de bandas de una red BBC.

dependencia de la energía con los vectores \vec{k} y \vec{G} . El vector \vec{k} toma los valores (100), (110), (001) y (111) correspondientes a cada uno de los paneles horizontales. Dentro de cada panel horizontal, de mantiene constante la dirección \vec{k} y se varían los valores m_1 , m_2 y m_3 , que corresponden a el cambio en el vector \vec{k} , es decir la traslación a otra zona de Brillouin. A continuación se presentan las interfaces gráficas construidas para desarrollar el modelo de

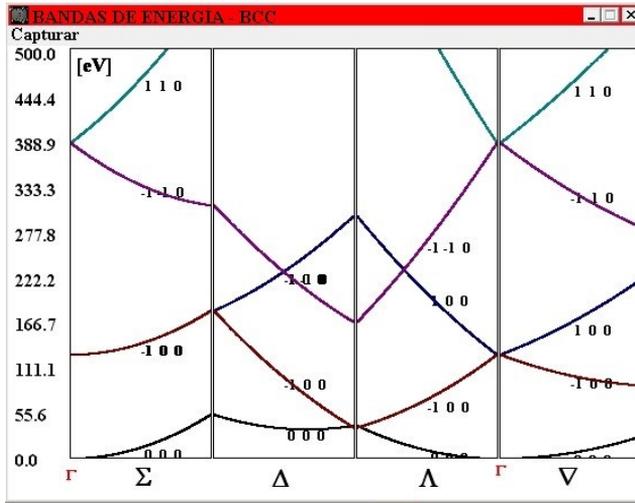


FIGURA 7. Resultados de la estructura de bandas de la red BCC.

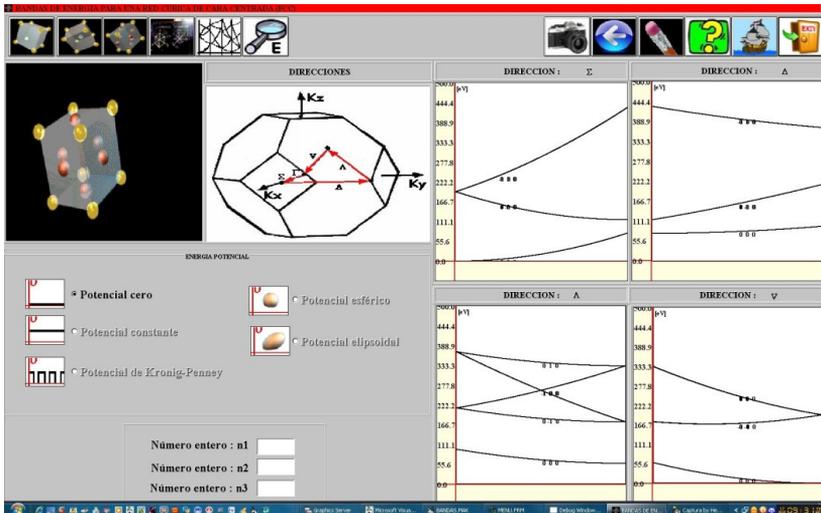


FIGURA 8. Interfaz gráfica empleada para la implementación del modelo de estructura de bandas de una red FCC.

estructura de bandas de materiales que presentan estructura cúbica simple (Figura 4), cubica centrada en el cuerpo (Figura 6) y cubica centrada en las caras (Figura 8). Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones se presentan en las Figuras 5, 7 y 9 para las estructuras CS, BCC y FCC respectivamente.

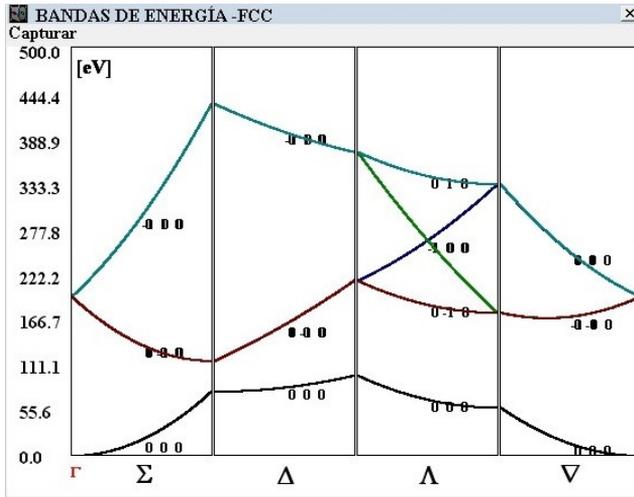


FIGURA 9. Resultados de la estructura de bandas de la red FCC.

Las interfaces gráficas tienen como objetivo facilitar el empleo del modelo, construyendo una ventana que permite una interacción más amable entre el usuario y la máquina. Es así como dentro de las tres interfaces presentadas se puede observar la red cristalina de la red de Bravais como se reporta en la literatura [20] y al lado se construyeron las primeras zonas de Brillouin para cada uno de los casos [22]. Estas estructuras se pueden visualizar en la parte izquierda superior de las interfaces. Posteriormente, en la parte izquierda inferior se incluyó la región interactiva de las interfaces. En ésta, se permite el ingreso de datos por el usuario. Finalmente, en la parte derecha se presentan las ventanas que permiten visualizar los resultados obtenidos. En dichos resultados, presentados en las Figuras 5, 7 y 9, se pueden observar las bandas de energías en las principales direcciones cristalográficas Σ , Δ y Γ para las direcciones (100), (110) y (111) respectivamente. Debido a que para el caso de este trabajo no se incluyó ningún potencial, estas bandas de energía concuerdan con las presentadas por materiales conductores (no se presentan gaps de energía). El modelo del electrón libre ha sido empleado para explicar el efecto fotoeléctrico [23]. Este modelo asume que los electrones se mueven libremente dentro de un metal, pero están confinados dentro del mismo. La energía mínima necesaria para extraer el electrón del metal es e^{Φ} , siendo

e la carga del electrón y Φ la función trabajo del material. Si se desea estudiar materiales como semiconductores o aislantes, es necesario incluir dentro del modelo el potencial de la red cristalina. Los contornos de las energías $E(k)$ están determinados por el vector de periodicidad G que inicialmente toma un valor $G = 0$ y posteriormente emplea todos los vectores de la red recíproca pertenecientes a la estructura que se está estudiando. Cada vector G producirá una banda de energía diferente, sin embargo, algunos de ellos pueden estar degenerados (tener el mismo valor de energía). Esta degeneración se observa especialmente en las Figuras 7 y 9 para las estructuras BCC y FCC, respectivamente. Los resultados obtenidos son similares a los presentados en diversos reportes [24]. Se puede observar además la influencia del tipo de estructura en la forma de las bandas y en su organización.

Por ejemplo, A.D. Davletshina et al [25] presentaron cálculos ab-initio de la estructura de bandas de soluciones sólidas de chalcogenidos de cobre y plata, los cuales no presentan bandas prohibidas. D.J. Newman [26] presenta resultados de cálculos de estructuras de bandas para redes cubica simple, centrada en el cuerpo y centrada en las caras basadas en técnicas que envuelven transformaciones de desacople. A diferencia de nuestro trabajo, en este documento se incluyen cálculos con potenciales diferentes de cero con la aproximación de *tight binding* para el estado d.

Conclusiones

Se desarrollaron modelos para el estudio de la estructura de bandas en redes cúbicas, empleando un modelo basado en el método de diferencias finitas con un arreglo 3D. El modelo propuesto en este trabajo empleó herramientas sencillas como las diferencias finitas, pero que a la vez permitieron obtener resultados similares a los encontrados en la literatura. Para modelar la estructura de bandas de un material se deben tener en cuenta las diferentes direcciones en las que sus electrones de conducción puedan moverse. Por esta razón, se deben obtener las energías del cristal en las principales direcciones como son (100), (110) y (111). De los resultados obtenidos se puede concluir que la estructura de bandas

de los materiales tiene una fuerte dependencia de su estructura cristalina. Se puede concluir además que por medio de una interfaz gráfica se puede facilitar el estudio y el análisis de la parte física referente a la estructura de bandas. En las simulaciones llevadas a cabo en este trabajo se consideró la aproximación del electrón libre (potencial cero). Sin embargo, para futuros trabajos y con el fin de estudiar materiales más reales, es necesario incluir dentro del modelo diferentes tipos de potenciales de acuerdo a cada tipo de material. Esto requiere de soluciones más complejas de la ecuación de Schrödinger.

Referencias

- [1] I. Rojas, C. Mora, and H. J. Herrera-Suárez, *Lat. Am. J. Phys. Educ.* **1**, 89 (2007).
- [2] A. Sutton, *Electronic Structure of Materials* (Clarendon Press, 1993).
- [3] J. Chelikowsky and S. Louie, *Phys. Rev. B* **29**, 3470 (1984).
- [4] S. Tsukamoto, K. Hirose, and S. Blügel, *Phys. Rev. E* **90**, 013306 (2014).
- [5] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [6] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [7] J. P. Perdew, K. Burke, and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **54**, 16533 (1996).
- [8] I. N. Remediakis and E. Kaxiras, *Phys. Rev. B* **59**, 5536 (1999).
- [9] R. Parr and R. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, International Series of Monographs on Chemistry (Oxford University Press, USA, 1989).
- [10] A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez, and W. Yang, *Science* **321**, 792 (2008).
- [11] L. Fritsche, *Phys. Rev. B* **33**, 3976 (1986).
- [12] J. Cordes and L. Fritsche, *Z. Phys. D* **13**, 345 (1989).
- [13] L. Fritsche and Y. M. Gu, *Phys. Rev. B* **48**, 4259 (1993).
- [14] F. E. Fajardo, J. A. Rodríguez, and J. H. Díaz, *Rev. Col. Fis.* **43**, 442 (2011).

- [15] E. Restrepo-Parra, S. Amaya-Roncancio, C. Bedoya-Hincapie, and J. Riaño-Rojas, *Superlatt. Microstruct.* **43**, 559 (2008).
- [16] A. Kokalj, *Comput. Mater. Sci.* **28**, 155 (2003).
- [17] M. Talati and P. K. Jha, *J. Mol. Struct.* **838**, 227 (2007).
- [18] A. Shames, E. Rozenberg, M. Auslender, G. Gorodetsky, C. Martin, K. Glazyrin, and Y. M. Mukovskii, *J. Magn. Magnet. Mater.* **300**, e163 (2006).
- [19] H. Rafii-Tabar, *Phys. Reports* **390**, 235 (2004).
- [20] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics*, HRW international editions (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- [21] C. Kittel, *Introduction to solid state physics* (Wiley, 1976).
- [22] D. Papaconstantopoulos, *Handbook of the band structure of elemental solids* (Plenum Press, 1986).
- [23] M. Adrian, *Experiments in Modern Physics* (Academic Press, New York, 1965).
- [24] W. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*, Dover Books on Physics (Dover Publications, 1989).
- [25] A. Davletshina, R. Yakshibaev, N. Bikkulova, Y. Stepanov, and L. Bikkulova, *Solid State Ionics* **257**, 29 (2014).
- [26] D. Newman, *J. Phys. Chem. Solids* **35**, 1187 (1974).