



## Estudio Mediante Tight-Binding y Método de Monte Carlo de las Propiedades Electrónicas de Si y Ge

Diego A. Rasero<sup>1</sup>, Tomás S. Suárez<sup>1</sup>, Rosbel A. Jiménez<sup>1</sup>, Jairo Arbey Rodríguez<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física y Electrónica, Universidad de Córdoba, Montería.

<sup>2</sup> GEMA – Grupo de Estudio de Materiales, Dpto. de Física, Universidad Nacional, Bogotá.

Recibido 23 de Oct. 2007; Aceptado 6 de Mar. 2009; Publicado en línea 30 de Abr. 2009

### Resumen

Se calcularon los estados electrónicos en volumen para los semiconductores Silicio (Si) y Germanio (Ge), usando el método Tight-Binding (TB), teniendo en cuenta interacciones hasta primeros vecinos. La matriz Hamiltoniana se construyó usando una base de orbitales atómicos  $s$ ,  $p$  y los estados excitados  $s^*$ . Basados en esta aproximación se procedió a calcular las relaciones de dispersión de la energía  $E$  contra número de onda  $\vec{k}$ , para algunas direcciones de alta simetría en la primera zona de Brillouin (PBZ). En seguida se determinaron los caracteres de las bandas y las densidades de estados (DOS) totales y parciales de acuerdo a los caracteres de los diferentes orbitales usados en la base en la que se escribió la matriz hamiltoniana.

**Palabras claves:** Estructura electrónica, Tight-Binding, Densidad de estados.

### Abstract

Electronic states were calculated in volume for both the Silicon (Si) and Germanium (Ge) semiconductors, by using the method Tight-Binding (TB), keeping in mind interactions up to first neighbors. The Hamiltonian matrix was built using a base of orbital atomic  $s$ ,  $p$  as well as the  $s^*$  excited states. Based on this approach, the relationships of dispersion of the energy  $E$  against wave number  $\vec{k}$ , for some addresses of high symmetry in the first zone of Brillouin (PBZ) were calculated. The characters of the bands and the densities of states were determined (DOS) both total and partial according to the orbital characters of the different ones used in the base in which the matrix Hamiltonian was written.

**Key Words:** Electronic structure, Tight-Binding, Density of states

©2009 Revista Colombiana de física. Todos los derechos reservados.

### 1. Introducción

Uno de los métodos que trata explícitamente la naturaleza mecánico-cuántica de los electrones que forman enlaces interatómicos, es el método tight-binding (TB) [1]. Las teorías que describen las bandas de Si y Ge usando TB  $sp$  a primeros vecinos, presentan dificultades de aproximación a los datos experimentales cuando no se tienen en cuenta estados excitados como por ejemplo los estado  $d$ . En este trabajo no se tienen en cuenta los estados  $d$  pero en su lugar se emplean estados excitados denotados por  $s^*$ , que poseen propiedades de simetría de estados  $s$ .

Este artículo está dividido en la siguiente forma: en la sección 2 se describe la base  $sp^3s^*$  los resultados se presentan

en la sección 3 y finalmente en la sección 4 se presentan las conclusiones.

### 2. Base $sp^3s^*$

Escogemos como base los estados de valencia que corresponde a los orbitales  $s$  y  $p$ , e incluimos los estados excitados  $s^*$ . Como existen dos átomos por celda unidad, la base de orbitales será:  $\{s_1, p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, s_1^*, s_2, p_{2x}, p_{2y}, p_{2z}, s_2^*\}$ . Esta base da origen a una matriz Hamiltoniana de  $10 \times 10$ .

Se Construye la matriz Hamiltoniana según la prescripción de P. Volg, *et al*, [2] en la base de orbitales de Löwdin

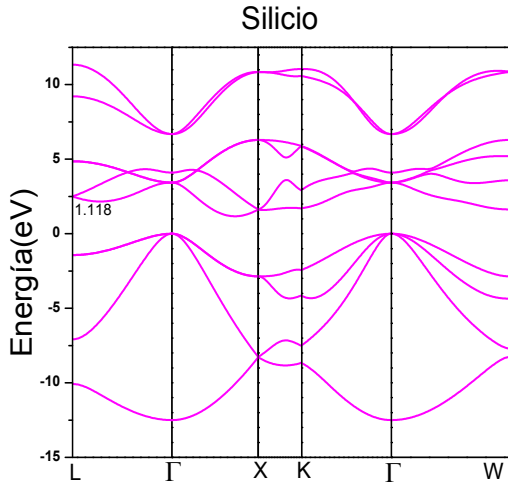


Fig. 1 Estructura electrónica del Silicio

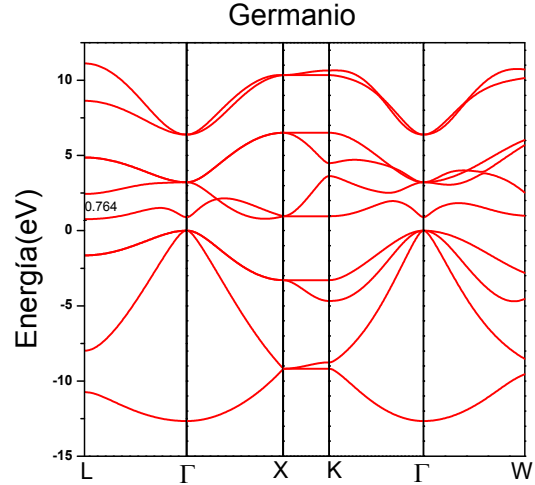


Fig. 2 Estructura electrónica del Germanio

$$|nb\vec{k}\rangle = N^{-1/2} \sum_{i,b} e^{ik \cdot (\vec{R}_i + \vec{V}_b)} |nb\vec{R}_i\rangle \quad (1)$$

En esta base la solución de la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$|k\vec{\lambda}\rangle = \sum_{n,b} |nb\vec{k}\rangle (nb\vec{k}|k\vec{\lambda}\rangle) \quad (2)$$

Donde  $n$  representa los orbitales  $s, p_x, p_y, p_z$  y  $s^*$  el vector de onda  $\vec{k}$  se encuentra en la PZB, el índice  $b$  se usa para distinguir entre aniones ( $a$ ) y cationes ( $c$ ),  $\vec{R}_i$  se usa para representar las posiciones aniónicas y  $\vec{V}_b$  para representar las posiciones catiónicas.

### 3. Resultados

Para cada valor del vector de onda  $\vec{k}$  se encuentran 10 valores propios de energía de la matriz Hamiltoniana, dando lugar a la estructura de bandas de cada elemento. En la Fig. 1 se presenta la estructura de bandas para el Silicio (Si) y en la Fig. 2 la estructura correspondiente al Germanio (Ge). En el eje horizontal se colocan los vectores de onda  $\vec{k}$ , a lo largo de algunos caminos de simetría en la PZB, y en el eje vertical los valores de energía (en  $eV$ ). De las 10 bandas que resultan, 4 están ocupadas por los electrones de valencia de cada átomo de Si o Ge. Por ello la banda de valencia (BV) está conformada por las 4 primeras bandas, de abajo hacia arriba. En el borde superior de la BV se ha colocado el cero de las energías. Las 6 bandas restantes conforman la banda de conducción (BC). En la estructura de bandas de Si,

en la Fig. 1, y Ge, en la Fig. 2, el punto de más alta simetría en la PZB es el punto  $\Gamma$ . Se observa que partiendo de él hacia el punto X, el número de simetrías que obedece  $\vec{k}$  disminuye, dando lugar al desdoblamiento de las bandas. En el punto  $\Gamma$ , en el borde superior de la BV, encontramos un triplete, pero en el camino  $\Gamma X$  las bandas se desdoblan, en un doblete y un singlete, destruyéndose el triplete; esto significa que se pierde la simetría. Si avanzamos a lo largo del doblete, hasta llegar al punto de alta simetría X y seguimos hacia W, vemos que el doblete se abre en dos singletes, mostrando que la simetría a lo largo del camino XW es menor que en el camino  $\Gamma X$ . En el resto de los caminos se observan con claridad las 10 bandas, de lo cual se sigue que en estos caminos disminuye la simetría.

En segundo lugar presentamos las gráficas de Densidades de Estados totales (*Density of States, DOS*) y parciales, para el Si y Ge (ver Fig. 3 y Fig. 4). En el eje horizontal se representan las energías en  $eV$  y en el eje vertical las DOS en  $eV^{-1}$ . En línea continua representamos la *DOS total*, en círculos la discriminación de los estados  $s$ , en cuadros la discriminación de los estados  $p$  y en estrellas la discriminación de los estados  $s^*$ .

A la izquierda del cero de energías se encuentra la BV, luego se encuentra una región donde no existen estados permitidos, correspondiente a la banda prohibida o *gap* de energías prohibidas. Después del *gap* se encuentra la BC. Para el Si el valor del *gap* encontrado en este trabajo es de 1.118  $eV$  aproximadamente. Para el Ge se encontró un *gap* de energías prohibidas de 0.764  $eV$  aproximadamente. Estos valores están cercanos a los valores experimentales y a los reportados en la literatura especializada [3, 4, 5, 6]. Las gráficas de las Fig. 1 y Fig. 2 muestran que los dos ma-

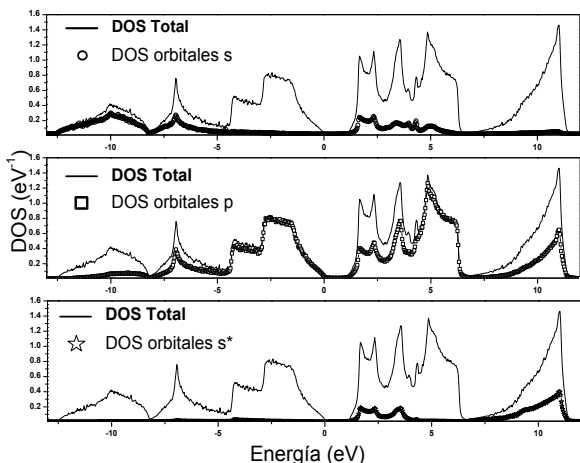


Fig.3 Densidad de estados total y parcial para Si.

teriales son semiconductores, con *gap* de energías prohibidas indirectos.

Las gráficas de las Fig. 3 y Fig. 4 muestran que los estados *s* tienen una alta probabilidad de encontrarse en la parte baja de la BV, los estados *p* tienen mayor probabilidad de encontrarse en la parte superior de la BV y en la parte baja de la BC y los estados *s\** se presentan con mayor probabilidad en la parte superior de la BC, esto concuerda con nuestro propósito de reemplazar estados *d*, de alta energía, por los *s\**.

### Conclusiones

Se determinaron estructuras electrónicas y densidades de estados DOS para Si y Ge usando una base de orbitales *s*, *p* y *s\**. Se comprobó que estos materiales son semiconductores con *gaps* de energía prohibida indirectos, como lo ratifican otros estudios experimentales y teóricos. Los orbitales *s\** se utilizaron para reproducir la banda de conducción sin necesidad de emplear estados *d*, lo cual hubiese dado lugar a una matriz de orden mayor haciendo más complejos los cálculos. Es importante anotar que un cálculo que incluya estados tipo *d* sería más preciso; sin embargo podemos considerar nuestros resultados bastante buenos, ya que se obtienen estructuras electrónicas y densidades de estados bastante acordes con los resultados experimentales y de otros métodos. Los *gaps* de energías prohibidas obtenidos según nuestros cálculos son bastante cercanos a los de la literatura especializada. Se obtuvieron los valores para Si y Ge de 1.118 eV y 0.764 eV, respectivamente. Los estados *s\**, como se esperaba aparecen con mayor probabilidad en la BC, teniendo poca probabilidad de encontrarse en la BV.

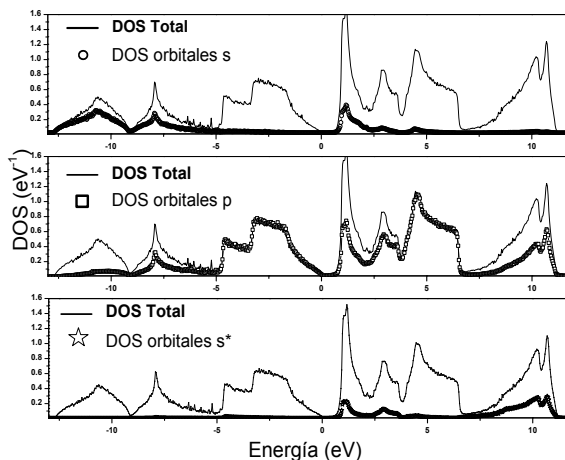


Fig.4 Densidad de estados total y parcial para Ge.

### Referencias

- [1] J. C. Slater and G. F. Koster. *Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem*. *Phys. Rev.*, 94(6):1498 {1524, June 15 1954.
- [2] H. P. Hjalmarson P. Vogl and J. D. Dow. *A Semi-Empirical Tight-Binding Theory Of The Electronic Structure Of Semiconductors*. *J. Phys. Chem. Solids*, 44(5):785, 1984.
- [3] Shalimova. *Física de Semiconductores*. MIR Moscú.
- [4] F. Brown. *Física de los sólidos*. Reverté
- [5] Ashcroft and Mermin. *Solid State Physics*. Thomson Learning, Inc. 1976.
- [6] Michael P. Marder. *Condensed Matter Physics*. John Wiley & Sons, Inc. 2000.