

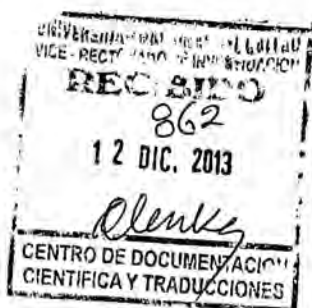


DIC 2013

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO**

**FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA**

**INSTITUTO DE INVESTIGACION DE LA FIQ**



INFORME FINAL DEL PROYECTO DE INVESTIGACION

**ESTUDIO DE LA ENERGÍA PROHIBIDA  
(GAP) EN SÓLIDOS CON ESTRUCTURA  
CRISTALINA DE DIAMANTE:  
APLICACIÓN A SILICIO (Si)**

AUTOR: Lic. CESAR CABRERA ARISTA

(PERIODO DE EJECUCION: Del 1 de Julio del 2012 al 31 de Diciembre del 2013)

(Resolución Rectoral N° 672-2012-R)

Callao, 2013

*May*  
*111Q*  
*09-12-2013*  
*08:30 hrs*  
*445*

*111Q*  
*May*  
*05/12/2013*  
*10:46 L.*  
*445*

# I INDICE

	Pág.
1: INDICE	1
1.1 Índice de tablas	3
1.2 Unidades atómicas empleadas	3
1.3 Siglas empleadas	4
2: RESUMEN	5
2.1 Resumen	5
2.2 Abstract	6
3.- INTRODUCCION	7
3.1 Planteamiento del problema	8
3.1.1 Enunciado del problema	9
3.1.2 Objetivo general	10
3.1.3 Objetivos específicos	10
3.1.4 Alcance de la investigación	10
3.2 Importancia y Justificación	11
4: MARCO TEÓRICO	12
4.1 Teoría del funcional densidad	12
4.2 La energía total del sistema	16
4.3 El potencial efectivo	19
4.4 El potencial del solido cristalino	20
4.5 La carga electrónica en el sólido	23
4.6 Los parámetros potenciales	25



4.7 La densidad de estados (DOS)	27
5: MATERIALES	31
5.1 Materiales	31
5.2 Métodos	31
6: RESULTADOS	33
6.1 El potencial efectivo	33
6.2 La estructura de las bandas de energía	37
6.3 La densidad de estados – DOS	42
6.4 La energía prohibida	50
6.5 La energía total	51
7: DISCUSION	52
7.1 El potencial efectivo	52
7.2 Las bandas de energía	52
7.3 La densidad de estados – DOS	55
7.4 La energía prohibida	56
7.5 La energía total	57
8: REFERENCIALES	59
9: APENDICES	62
10: ANEXOS	63

<b>1.1 Índice de tablas</b>	<b>Pág.</b>
TABLA N° 6.1: El potencial efectivo – LDA, Esferas de Si	33
TABLA N° 6.2: El potencial efectivo – LDA, Esferas Vacías	35
TABLA N° 6.3: Las bandas de energía, para $\gamma = 0.0$	40
TABLA N° 6.4: Las bandas de energía, para $\gamma = 1.0$	41
TABLA N° 6.5: La Densidad de estados DOS, para $\gamma = 0.0$	42
TABLA N° 6.6: La Densidad de estados DOS, para $\gamma = 1.0$	43
TABLA N° 6.7: La Energía prohibida	50
TABLA N° 6.7: La Energía total	51

## 1.2 Unidades atómicas empleadas

1 a. u. = 1 atomic-unit =  $0.529 \times 10^{-10}m = a_0$  (radio de Bohr)

1 Ry. = 1 Rydberg = 13.6058eV (Unidad de energía atómica)

1 eV = 1 electrón-Volt =  $1.60219 \times 10^{-19}J$  (Unidad de energía atómica)

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \times 10^{-34}J \cdot s$  (Contante de Planck)

$e = 1.6022 \times 10^{-19}C$  (Carga del protón)

$m_e = 9.1096 \times 10^{-31}kg$  (Masa del electrón)



### 1.3 Siglas empleadas

DOS = Density of Occupied States

EBS = Electronic Band Energy

LMTO = Linear muffin Tin Orbital

SDF = Spin Density Functional

LDA = Local Density Approximation

LSDA = Local Spin Density Approximation

ASA = Atomic Sphere Approximation

FCC = Face Center Cubic

FBZ = First Brillouin Zone

IFBZ = Irreducible First Brillouin Zone

$E_F$  = Fermi Energy

$E_G$  = Gap Energy

KS = Kohn - Sham

a. u. = atomic unit

Ry = Rydberg

eV = electrón-Volt



## II RESUMEN

### 2.1 Resumen

En la presente investigación se ha realizado un estudio teórico de la región de energía prohibida (brecha de energía) del silicio sólido con estructura cristalina de tipo diamante. La energía prohibida se ha determinado indirectamente a partir del cálculo de la estructura electrónica: las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) en el estado fundamental ( $T = 0K$ ) usando el método de los orbitales lineales muffin-tin (LMTO).

De los resultados obtenidos, para la máxima transferencia de la carga electrónica hacia las regiones de menor ocupación en la red cristalina, de toda la carga que está más allá del radio de las esferas atómicas, se obtiene un excelente perfil de la estructura electrónica, que además está desplazada hacia regiones de energía más profundas, con una energía total mínima de  $-16.85Ry$  por celda unitaria. Para este valor de energía mínima, la región de energía prohibida (el gap) es de  $0.099Ry$ , que equivale a  $1.35eV$ , un valor cercano al gap experimental de  $1.17eV$  que existe en la literatura.

Palabras Claves: Sólidos cristalinos, bandas de energía, densidad de estados.



## 2.2 Abstract

In the present investigation carried out a theoretical study of the region of forbidden energy (energy gap) of solid silicon with crystal structure of diamond-like. The forbidden energy indirectly determined from the calculation of the electronic structure: energy bands and the density of States (DOS) in the ground state ( $T = 0$  K) using the method of the orbital linear muffin-tin (LMTO).

The results, for the maximum transfer of electronic charge towards the regions of lower occupancy in the Crystal network, all cargo which is beyond the radius of Atomic spheres, you get an excellent profile of the electronic structure, which is displaced towards deeper regions of energy, with a minimum total energy of  $-16.85\text{Ry}$  per unit cell. For this value of minimum energy, the region of forbidden energy (the gap) is  $0.099\text{Ry}$ , which is equivalent to  $1.35\text{eV}$ . A value close to the experimental energy gap of  $1.17\text{eV}$ .

Keywords: Crystalline Solids, Electronic band structure, density of states.



### III INTRODUCCION

En la última década el intento de un mejor aprovechamiento de las propiedades de los materiales semiconductores ha incentivado geoméricamente la investigación de estos, tanto a nivel teórico como experimental. Los materiales semiconductores son de gran interés en aplicaciones tecnológicas por sus excelentes propiedades físicas y, más aun el estudio de las propiedades electrónicas de los materiales semiconductores de aplicación en la tecnología óptica y electrónica, tales como el Silicio (Si), el Germanio (Ge), entre otros. Propiedades que los hacen insumos de uso común en el desarrollo tecnológico.

En la actualidad gran parte de la investigación de las propiedades electrónicas de los nuevos materiales se hacen en primera instancia con técnicas y modelos de simulación en computadoras, puesto que resulta más fácil de realizar en comparación con las investigaciones experimentales que muchas veces requieren de algunos equipos técnicamente muy sofisticados, generalmente de alto costo, se requieren de materiales o insumos difíciles de conseguir en su estado altamente puro, por lo que en la práctica resulta ventajoso y más económico un primer estudio teórico que permita predecir las propiedades electrónicas de los materiales semiconductores.

Aunque se han publicado recientemente artículos de investigación sobre las propiedades electrónicas de algunos materiales semiconductores tales como: el método de Monte Carlo de D. A. Rasero (2009) [1]; el método del Pseudo-





potencial de P. Moontragoon (2007) [2]; el método de la cuasi-partícula de J. Majewski (2004) [3]; el método del Pseudo-potencial con ondas planas de S. H. Ke (1999) [4]; el método de Hartree-Fock y de W. Von Der Linde (1986) [5]; entre otros que destacan las propiedades semiconductoras del silicio, el propósito de la presente investigación es mostrar que se pueden predecir las propiedades electrónicas: la estructura de las bandas de energía, la densidad de estados(DOS) usando el método alternativo de los orbitales lineales muffin tin o método LMTO [6] y, a partir de estos resultados determinar la región de la energía prohibida para el silicio (Si), esta región de la energía prohibida, conocida como gap, caracteriza la naturaleza semiconductor de este material.

En los artículos de investigación, se destaca la estructura electrónica (las bandas de energía, la densidad de estados ocupados DOS) y el gap (la región de energía prohibida) como las características de mayor importancia en las propiedades electrónicas de un material del silicio (Si) y en general de cualquier material semiconductor.

### **3.1 Planteamiento del problema**

El eficiente uso de los materiales semiconductores como el silicio, requieren de un conocimiento previo de sus propiedades electrónicas y de la magnitud de la brecha de energía prohibida de los electrones en la red cristalina. Pero, esta región de energía prohibida (brecha de energía) resulta muy sensible a los pequeños cambios de la carga electrónica en las regiones de menor ocupación atómica en la



red cristalina que presenta el silicio, situación similar que se presenta en otros materiales semiconductores. Por lo tanto surge la siguiente pregunta:

### 3.1.1 Enunciado del problema

¿Es posible determinar los cambios de la región de la energía prohibida debido a la transferencia de la carga electrónica a la red cristalina en los materiales semiconductores como el silicio con estructura de diamante?

Ante esta pregunta surge la alternativa de la presente investigación: Es posible cuantificar el efecto de la transferencia de carga en la red cristalina, sobre la brecha de la energía prohibida del silicio, a partir del cálculo de las propiedades electrónicas como: la estructura de las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) del material.

Las propiedades electrónicas se pueden determinar usando el método LMTO de Hans L. Skriver [6]. Con la idea de C. Cabrera [7] usando un parámetro  $\gamma$  ( $0 < \gamma < 1$ ), es posible efectuar la transferencia de una pequeña parte de la carga electrónica de valencia del átomo a las regiones sin ocupación atómica que presenta la red cristalina de silicio. Dado que el potencial inicial de interacción del electrón en la red, que nos permite calcular la estructura electrónica del material depende la carga electrónica, este potencial también depende del parámetro  $\gamma$  que permite estudiar el efecto de la pequeña transferencia de carga electrónica a la red.



### **3.1.2 Objetivo general**

Estudiar los cambios en la magnitud de la energía prohibida de los electrones debido a la transferencia de la carga electrónica a las regiones de menor ocupación en la red cristalina, a partir de las propiedades electrónicas (las bandas de energía, la densidad de estados) del silicio. Así como identificar las propiedades electrónicas y su relación con la naturaleza del tipo de enlace en la fase cristalina del silicio usando el método LMTO.

### **3.1.3 Objetivos específicos**

- a) Determinar las bandas de energía del estado fundamental del silicio para los diferentes porcentajes de transferencia de carga electrónica a la red.
- b) Determinar la densidad de estados y la energía prohibida para los diferentes porcentajes de transferencia de carga electrónica a la red.
- c) Calcular la energía total en función del parámetro de transferencia de la carga electrónica del átomo a la red cristalina.

### **3.1.4 Alcance de la investigación**

Este proyecto a realizar es una investigación básica aplicada al campo de la materia Condensada. Los resultados de la investigación se pueden contrastar con los resultados de la investigación teórica y experimental publicada en revistas internacionales de especialidad, tales como la Physical Review B, Physical

Review Letter, etc. Los resultados son útiles en el campo de los nuevos materiales. El sector beneficiado es el de los productores de materiales semiconductores.

### **3.2 Importancia y justificación de la investigación**

El presente estudio fue motivado por la necesidad de establecer y describir la redistribución de la carga electrónica en la red cristalina y su efecto sobre la región de energía prohibida y sobre la estructura electrónica del Silicio (Si) como elemento de estudio usando la teoría de las bandas de energía. El estudio de este material semiconductor se justifica por las razones siguientes: 1) debido a su importancia tecnológica ha sido bien estudiado en forma experimental, 2) tiene una gran historia y existe literatura teórica sobre el tema, 3) debido al número atómico del silicio  $Z = 14$ , la interacción spin-orbita es pequeña frente a los demás términos por lo que en los cálculos de este trabajo no se consideraran.

La importancia y el aporte científico de la presente investigación se sustentan en el modelo sencillo que se utilizará para la distribución electrónica de valencia en el sólido, lo que a su vez permite determinar las propiedades electrónicas y la naturaleza del tipo de enlace del material. Y además porque no decir, obtener mejores resultados en comparación con las investigaciones experimentales realizadas.



## IV MARCO TEÓRICO

### 4.1.- Teoría de la funcional densidad

El formalismo de la Funcional Densidad la presentamos siguiendo la elegante y simple aproximación de Levy [8]. Esta teoría es formalmente exacta y nos permite realizar el estudio de sistemas con un gran número de partículas. Considerando un sistema de N electrones con su Hamiltoniano de la forma:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ee} + \sum_i v(\vec{r}_i) \quad (4.1.1)$$

Donde T es el operador de energía cinética,  $\hat{V}_{ee}$  es el operador de la energía potencial colombiana y  $V(\vec{r}_i)$  es un campo escalar externo. Considerando a  $n_\uparrow(\mathbf{r})$  y  $n_\downarrow(\mathbf{r})$  como la densidad del número de spin up (+1/2) y del número de spin down (-1/2) respectivamente, se define convenientemente una funcional universal de la forma:

$$Q[n_\uparrow, n_\downarrow] = \min \langle \hat{T} + \hat{V}_{ee} \rangle \quad (4.1.2)$$

Que busca, el grupo de funciones de onda anti-simétrica de las partículas, que reproducen la densidad del número de spin dado por:  $n_\sigma(\mathbf{r}) = \langle n_\sigma(\mathbf{r}) \rangle$ . De esta manera el principio variacional ( $\langle H \rangle \geq E =$  energía del estado fundamental) implica que para cualquier grupo de funciones onda de spin  $n_\uparrow$  y  $n_\downarrow$  (up y down respectivamente) representando a los N electrones se tiene:

$$Q[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] + \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) \geq E \quad (4.1.3)$$

Donde  $n(\mathbf{r})$  está dado por la ecuación (4.1.5) si es la correcta densidad de spin del estado fundamental, hace que la ecuación (4.1.3) sea una igualdad. Esta condición se conoce como el teorema generalizado de Hohenberg-Kohn [9]. El principio variacional (4.1.3) se podría usar para calcular la densidad de spin  $n_{\uparrow}$  y  $n_{\downarrow}$  y la energía  $E$ , si la dependencia funcional de  $Q$  respecto de  $n_{\uparrow}$  y  $n_{\downarrow}$  fuese conocida. Como no es el caso, resulta muy conveniente escribir  $Q[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$  en tres términos como sigue:

$$Q[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = T[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] + U[n] + E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] \quad (4.1.4)$$

Donde  $T[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$  es la energía cinética de las  $N$  partículas, definida anteriormente.  $U[n]$  es la clásica energía potencial de interacción colombiana y  $E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$  describe la energía de intercambio y correlación entre las partículas. Esta es la energía que considera todos los efectos cuánticos que no se toman en cuenta en la energía clásica de Hartree [10].

La densidad de spin puede escribirse en término de los orbitales orto-normales y el número de ocupación  $f_{\alpha\sigma}$  en el intervalo  $0 < f_{\alpha\sigma} < 1$ , de modo que vale la siguiente ecuación:

$$n_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha\sigma} |\psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r})|^2 \quad (4.1.5)$$



Por lo que se puede definir la energía cinética  $T$  de las  $N$  partículas en función de los orbitales orto-normales. Así definimos [11]:

$$T[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = \min \left[ \sum_{\alpha\sigma} f_{\alpha\sigma} \langle \psi_{\alpha\sigma} | -\nabla^2 | \psi_{\alpha\sigma} \rangle \right] \quad (4.1.6)$$

Donde el mínimo es sobre todos los posibles  $f_{\alpha\sigma}$  y sobre todos los orbitales que definen a la densidad de spin dada. Siguiendo a Janak [12], se reescribe la ecuación (4.1.3) y se obtiene la siguiente ecuación:

$$\tilde{E} = \sum_{\alpha, \sigma} f_{\alpha\sigma} \langle \psi_{\alpha\sigma} | -\nabla^2 | \psi_{\alpha\sigma} \rangle + U(n) + E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] + \int d^3r \sum_i V(\vec{r}_i) n(\vec{r}) \quad (4.1.7)$$

Asumiendo un grupo de ocupación  $f_{\alpha\sigma}$  previamente establecido, minimizamos la ecuación (4.1.7) con respecto a los orbitales  $\psi_{\alpha\sigma}$ , con la densidad de spin  $n_{\sigma}(\mathbf{r})$  dado por (4.1.5) y, con orbitales  $\psi_{\alpha\sigma}$  sujetos a la condición de normalización, resultando entonces la ecuación de Euler:

$$\frac{\delta}{\delta \psi_{\alpha\sigma}^*(\vec{r})} \left( \tilde{E} - \sum_{\alpha\sigma} f_{\alpha\sigma} \epsilon_{\alpha\sigma} \int d^3r |\psi_{\alpha\sigma}(\vec{r})|^2 \right) = 0 \quad (4.1.8)$$

Donde  $f_{\alpha\sigma} \epsilon_{\alpha\sigma}$  son los multiplicadores de Lagrange. El resultado de resolver (4.1.8) es la ecuación auto consistente de Kohn-Sham [13] para el electrón:

$$[ -\nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}) ] \psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) = \epsilon_{\alpha\sigma} \psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) \quad (4.1.9)$$



Con un potencial efectivo  $V_{eff}(\mathbf{r})$  correspondiente al orbital con número cuántico de spin  $\sigma$ , el cual contiene tres términos y es de la siguiente forma:

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + u[n, \mathbf{r}] + V_{xc}^{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (4.1.10)$$

Donde el potencial de interacción electrónica colombiana clásica es de la siguiente forma:

$$u[n, \mathbf{r}] = \frac{\partial U(n)}{\partial n(\mathbf{r})} = 2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' \quad (4.1.11)$$

Y todos los efectos cuánticos que no se toman en cuenta en la clásica interacción colombiana se dan a través del potencial de intercambio y correlación que es de la forma:

$$V_{xc}^{\sigma}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}] = \frac{\partial E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]}{\partial n_{\sigma}(\mathbf{r})} \quad (4.1.12)$$

El significado de los  $\epsilon_{\alpha\sigma}$  como auto-valores son bien explicados por un argumento de Slater [14] y Janak [12]. Cálculos con la funcional de la densidad de spin (SDF) podrían dar resultados exactos si la  $E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$  fuera conocida y usada en las ecuaciones. A menudo en los cálculos se hace la aproximación de la densidad local de spin (LSDA) [15], [5]

$$E_{xc}^{LSD} = \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}[n_{\uparrow}(\mathbf{r}), n_{\downarrow}(\mathbf{r})] \quad (4.1.13)$$

Donde  $\epsilon_{\alpha\sigma}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$  es la densidad de energía de intercambio y correlación delgas de electrones con densidad de spin  $n_{\uparrow}$  y  $n_{\downarrow}$  dadas.





#### 4.2.- La energía total del sistema

La siguiente fase del trabajo consiste en el cálculo de la energía total con el propósito de tener resultados cuantitativos de las aproximaciones que se usan en el presente trabajo y discutir la estabilidad del sistema bajo estas aproximaciones. Formulamos la energía total del sistema en la aproximación LDA a partir de la ecuación (4.1.7), la cual tiene la siguiente forma:

$$E = \sum_{\alpha, \sigma} f_{\alpha\sigma} \langle \psi_{\alpha\sigma} | -\nabla^2 | \psi_{\alpha\sigma} \rangle + U(n) + E_{xc}^{LSD}(n) + \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \quad (4.2.1)$$

El término que representa la energía cinética de los electrones tiene la siguiente forma:

$$T = \sum_{\alpha, \sigma} f_{\alpha\sigma} \langle \psi_{\alpha\sigma} | -\nabla^2 | \psi_{\alpha\sigma} \rangle \quad (4.2.2)$$

El término que representa la clásica energía potencial de interacción colombiana, tiene la siguiente forma:

$$U[n] = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (4.2.3)$$

El próximo término es la energía de intercambio y correlación en la aproximación LDA [15], la cual es de la forma:

$$E_{xc}^{LSD}[n] = \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}[n(\mathbf{r})] \quad (4.2.4)$$



El término que sigue es la contribución de un potencial escalar externo  $V(\mathbf{r})$  que para nuestro caso es la conocida energía de Madelung [16] que representa la interacción del electrón con los iones en el sólido:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{2z}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} \quad (4.2.5)$$

Una de las partes más difíciles de tratar en la formulación de la energía total, es el término que corresponde a la energía cinética, se puede calcular expresando la energía cinética en términos de los valores propios de energía y del potencial efectivo que apantalla al electrón. Para salvar esta situación se recurre a la ecuación (4.1.9), multiplicando a esta ecuación por la izquierda, con el orbital  $\Psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r})$  luego sumando sobre todos los orbitales (ya ocupados), se obtiene la siguiente ecuación:

$$\sum_{\alpha,\sigma} f_{\alpha\sigma} \langle \Psi_{\alpha\sigma} | -\nabla^2 | \Psi_{\alpha\sigma} \rangle = \sum_{\alpha,\sigma} \epsilon_{\alpha\sigma} - \sum_{\alpha,\sigma} \int d^3\mathbf{r} \Psi_{\alpha\sigma}^*(\mathbf{r}) V_{\text{eff}}^\sigma(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r}) \quad (4.2.8)$$

Donde el último término a la derecha de la ecuación anterior, tiene la forma:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\sigma} \int d^3\mathbf{r} \Psi_{\alpha\sigma}^*(\mathbf{r}) V_{\text{eff}}^\sigma(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{2n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &+ \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) V_{xc}^{LSD} [n(\mathbf{r})] + \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

Reemplazando (4.2.8) en (4.2.1) se obtiene una expresión general para la Energía Total del sistema, de la forma siguiente:

$$E = \sum_{\alpha, \sigma} \varepsilon_{\alpha\sigma} - \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \int d^3\vec{r} n(\vec{r})V_{xc}^{LSD}(\vec{r}) - \int d^3\vec{r} n(\vec{r})V(\vec{r}) \quad (4.2.10)$$

La ecuación (4.2.10) es la forma más general de la energía total de un sistema de N partículas en la aproximación LDA. Como nosotros resolvemos la ecuación de Schrödinger para los electrones de valencia, dentro de la aproximación de la coraza congelada, usamos la misma distribución electrónica de los electrones de coraza como en el átomo libre. Esto permite describir la densidad electrónica total de la forma:

$$n(\vec{r}) = n_c(\vec{r}) + n_v(\vec{r}) \quad (4.2.11)$$

Donde  $n_c(\vec{r})$  representa la densidad de electrones de coraza y  $n_v(\vec{r})$  la de electrones de valencia y  $n_c(\vec{r})$  se calcula una sola vez. Con esta ecuación (4.2.11) en cuenta, podemos describir la energía total y así obtener una ecuación del tipo (4.2.10) pero solo para los electrones de valencia y toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \tilde{E} = & \sum_{\alpha, \sigma}^{val} \varepsilon_{\alpha\sigma}^{LSD} - \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{n_v(\vec{r})n_v(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \int d^3\vec{r} n_v(\vec{r})V(\vec{r}) \\ & - \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' n_v(\vec{r}) \left\{ V_{xc}^{LSD}(n, \vec{r}') - \varepsilon_{xc}^{LSD}(n, \vec{r}') \right\} - \int d^3\vec{r} n_c(\vec{r}) u_{xc}^{LSD}(n, \vec{r}) \end{aligned} \quad (4.2.12)$$

### 4.3.- El potencial efectivo


Formular el potencial efectivo de la interacción de los electrones, generalmente es muy difícil y complicado. Para el cálculo de la estructura de las bandas de energía es muy común aproximar todo el volumen del cristal sólido por esferas atómicas que ocupan este mismo volumen del cristal sólido.

Esta aproximación, conocida como la ASA [17], nos permite formular el potencial efectivo de interacción electrónica únicamente con dependencia radial. De manera que el potencial efectivo está promediado sobre todo el ángulo sólido de la esfera atómica, lo que equivale a integrar sobre todo el ángulo sólido de la esfera atómica y se puede escribir:

$$\langle V_{eff}(\vec{r}) \rangle = V_{eff}(r) \quad (4.3.1)$$

Se puede demostrar que al resolver en forma explícita este promedio sobre el ángulo sólido de la esfera atómica, llegamos finalmente a la siguiente ecuación:

$$V_{eff}(r) = 2 \int_0^{\pi} dr \frac{4\pi r^2 n(r)}{r} + V_{xc}[n(\vec{r})] + v_{ion}(r) \quad (4.3.2)$$

Aquí puede notarse, que este potencial efectivo de interacción es solo función de la coordenada radial  $r$ , de manera que vale  $V = V(r)$ . Cabe mencionar que sin este promedio sobre el potencial efectivo sería muy difícil (casi imposible) de resolver la ecuación de Schrödinger para el electrón moviéndose en un potencial efectivo real. 

Esta última ecuación para el potencial efectivo nos permite escribir formalmente la parte radial de la ecuación de Schrödinger para el electrón en un medio efectivo descrito por el potencial efectivo, la cual es de la siguiente forma:

$$\frac{d^2 P_l(r)}{dr^2} + \left[ \epsilon_l + \frac{l(l+1)}{r^2} - V_{\text{eff}}(r) \right] P_l(r) = 0 \quad (4.3.3)$$

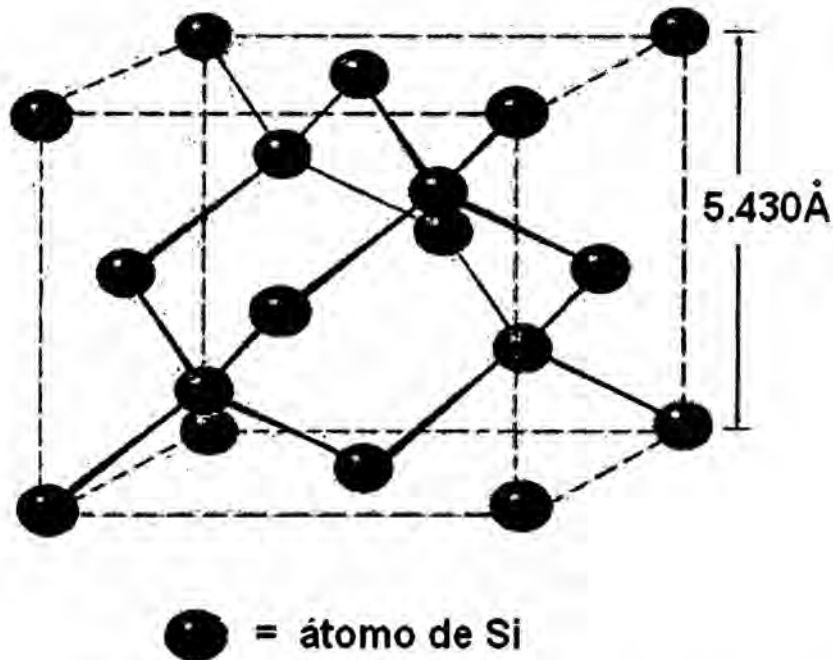
Como vemos esta ecuación (4.3.3) depende del número cuántico principal "l", donde  $l = \alpha$ , representa la clase de orbital en la solución de (4.3.3). Aquí no se trata explícitamente la ecuación diferencial de Schrödinger para la parte angular, pues sus soluciones los armónicos esféricos, ya se encuentran tabulados en la literatura.

#### 4.4.- El potencial del sólido cristalino

En el estado fundamental el silicio presenta una fase sólida con una estructura cristalina tipo diamante, con una constante de red  $a = 5.430 \text{ \AA}$ . Esta estructura cristalina abierta, se puede considerar como dos redes de Bravais, desplazadas a lo largo de la línea diagonal del cubo, un cuarto de longitud de la constante de la red cristalina.

Por tanto la red cristalina de diamante puede ser vista como dos redes FCC superpuestas, con puntos de base en  $(0,0,0)a$  y  $(1,1,1)a/4$ . Esta red se puede apreciar en la Figura 4.1 en la siguiente página.

FIGURA N° 4.1  
ESTRUCTURA CRISTALINA DEL SILICIO



Fuentes: Neil Ashcroft and N. Mermin. *Solid State Physics* [19].

Como la red de tipo diamante, es una estructura abierta, posee regiones a lo largo de la diagonal sin ocupación atómica. El espacio de estas regiones se llena con esferas del mismo tamaño que las esferas atómicas de silicio, a las que se transfiere una pequeña parte de la carga electrónica de valencia que está fuera o más allá del radio de las esferas atómicas. La transferencia se hace mediante el parámetro  $\gamma$ , que varía entre 0 y 1, el que será definido más adelante.

De este modo, para el átomo que está centrado en la posición  $\mathbf{R}$ , el potencial efectivo  $V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ , que está descrito por la ecuación (4.3.2), ya contiene toda la información sobre la estructura de la red cristalina de tipo diamante, tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
V^{\alpha\sigma}_{R_i}(r) = & -\frac{2Z_{R_i}}{r} + \frac{1}{r} \int_0^r dr' 2\sigma_{R_i}(r') + \int_r^{S_R} \frac{2\sigma_{R_i}(r')}{r'} dr' \\
& + V_{xc}[n_{R_i}(r)] - \sum_{R'} 2q_{R'} \sum_{T'} \frac{1}{|\bar{R} - \bar{R}' - \bar{T}'|}
\end{aligned}
\tag{4.4.1}$$

En la que aparece un término adicional, dado por:

$$V_{M_i} = -\sum_{R'} 2q_{R'} \sum_{T'} \frac{1}{|\bar{R} - \bar{R}' - \bar{T}'|}
\tag{4.4.2}$$

Que representa la interacción entre las esferas vacías de la diagonal cuando poseen una parte de la pequeña carga electrónica transferida a esta. El apostrofe ' en la sumatoria significa que en la doble suma se excluye el término  $\mathbf{R} = \mathbf{R}' + \mathbf{T}$ . Este término adicional (4.4.2) se conoce como el potencial de Madelung [16], y para determinar su contribución al potencial también se necesita conocer la distribución de la carga electrónica que hay en las esferas vacías de la red cristalina.

Como para este caso es válida, la ecuación (4.2.11) y como en las esferas vacías no poseen carga de coraza, para estas se cumple que  $n^c_{R}(r) = 0$  y además vale la ecuación (4.2.3). Aquí el problema es conocer la densidad de carga electrónica de los electrones de valencia  $n^v_{R}(r)$ , que es completamente diferente en el sólido que para el átomo libre y que se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger (4.2.3) auto-consistentemente.





#### 4.5.- La carga electrónica en el sólido

La densidad electrónica en el sólido está definida de la forma siguiente:

$$Z_i = \tilde{Z}_i^{at} + \sum_{j \neq i} q_j^{at} \gamma_{ji} \quad (4.5.1)$$

Donde  $\gamma_{ji}$  es la fracción de  $q_j^{at}$  en la esfera atómica alrededor del punto  $\mathbf{R}_i$  de manera que:

$$\sum_{j \neq i} \gamma_{ji} = 1 \quad (4.5.2)$$

El número total de electrones de los átomos libres debe ser igual al número total de los electrones en las esferas atómicas y vacías en el sólido, por consiguiente debe valer:

$$\sum_i Z_i^{at} = \sum_i Z_i \quad (4.5.3)$$

La estructura de diamante contiene 2 esferas atómicas por celda elemental FCC, que están situadas en  $\mathbf{R}_1 = (0,0,0)a$  y  $\mathbf{R}_2 = (1,1,1)a/4$  corresponden a átomos de la misma clase, tales como los átomos de Si y, las esferas que están centradas en los puntos  $\mathbf{R}_3 = (1,1,1)a/2$  y  $\mathbf{R}_4 = (1,1,1)3a/4$  son las esferas vacías. De este modo resulta

$$Z_3^{at} = Z_4^{at} = 0; \tilde{Z}_3^{at} = \tilde{Z}_4^{at} = 0; q_3^{at} = q_4^{at} = 0 \quad (4.5.4)$$

La carga  $q_j^{at}$  que en el átomo libre  $i$  no está concentrada en la esfera atómica se transfiere sobre las otras esferas.





Tomando en cuenta la simetría de la estructura “diamante”, se nota que las esferas atómicas 1 y 2 son equivalentes al igual que las esferas vacías 3 y 4, de esto resulta:

$$\gamma_{12} = \gamma_{21}; \gamma_{13} = \gamma_{31}; \gamma_{23} = \gamma_{32} \quad (4.5.5)$$

Sea  $\gamma_{12} = \gamma$ , con (4.5.2) para cada esfera atómica se obtiene:

$$\gamma_{13} = \gamma_{14} = \gamma_{23} = \gamma_{24} = \frac{1-\gamma}{2} \quad (4.5.6)$$

Estas relaciones junto con la fórmula (4.5.1) nos permiten escribir las cargas electrónicas en las esferas atómicas en el sólido:

$$\begin{aligned} Z_1 &= \tilde{Z}_1^{at} + \gamma q_2^{at} & Z_2 &= \tilde{Z}_2^{at} + \gamma q_1^{at} \\ Z_3 &= Z_4 = \left(\frac{1-\gamma}{2}\right)(q_1^{at} + q_2^{at}) \\ & & (0 < \gamma < 1) & \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

Además con la ecuación (4.5, 3) se puede calcular la carga de exceso, que están dadas por:

$$\begin{aligned} q_1 &= q_1^{at} - \gamma q_2^{at} & q_2 &= q_2^{at} - \gamma q_1^{at} \\ q_3 &= q_4 = -\left(\frac{1-\gamma}{2}\right)(q_1^{at} + q_2^{at}) \end{aligned} \quad (4.5.8)$$

Como una fracción muy pequeña de los electrones de coraza tiene contribución fuera de su esfera atómica, se usa la aproximación de la carga congelada y se

distribuye homogéneamente sobre su esfera atómica y no sobre las otras esferas, de esta manera resulta:

$$n_{R_i,cor}(r) = n_{R_i,cor}^{at}(r) + \frac{3 q_{R_i,cor}^{at}}{4\pi w^2} \quad (4.5.9)$$

Se obtiene una carga electrónica de coraza re-normalizada. Notamos que la carga electrónica en el sólido depende de el parámetro  $\gamma$  ( $0 < \gamma < 1$ ) y con las formulas (4.5.1) y (4.5.7) el potencial depende de este parámetro, por consiguiente hemos parametrizado el potencial inicial en el sólido. Además las ecuación (4.5.1) y la ecuación (4.5.7) valen también para cada orbital  $\Psi_{\alpha\sigma}(r)$ .

#### 4.6.- Los parámetros potenciales

Con el método del capítulo3 formulamos los potenciales  $V_R(r)$  para cada orbital en cada esfera atómica o vacía, potenciales que en general son diferentes. Para obtener los parámetros potenciales y los parámetros de apantallamiento con corrección de auto interacción, resolvemos en cada esfera y para cada orbital la ecuación radial de Schrödinger (4.3.3) para valores de energía  $E_\mu$  dados.

Las soluciones de (4.3.3) con un  $E_\mu$  fijo son las ondas parciales. Se elige valores  $E_\mu$  tal que corresponden a energías alrededor de las cuales se requiere las bandas electrónicas y la DOS con precisión. Vale a grandes rasgos la regla de que las bandas electrónicas en la región  $\pm 0.5Ry$  alrededor de  $E_\mu$  están bien descritas en esta aproximación.



La elección de estos  $E_\mu$  requiere conocerse las regiones de los estados electrónicos relevantes, por ejemplo la brecha entre la banda de valencia y la de conducción. Para obtener las regiones relevantes, calculamos las bandas con auto consistencia parcial para obtener el  $E_\mu$ . En esta auto consistencia se resuelve la ecuación de Schrödinger únicamente en las esferas, se define un  $E_\mu$  inicial que generalmente es igual a cero ( $E_\mu = 0$ ) con una densidad electrónica  $n_R^v(r)$  y un potencial  $V_R^{as}(r)$  inicial, en nuestro caso los construidos en el capítulo 3, se resuelve la ecuación (4.3.3) y se calcula los parámetros potenciales  $C_\mu$ ,  $\delta_\mu$  y el de apantallamiento  $Q_\mu$  del sólido. Como no se ha tomado en cuenta el efecto del sólido sobre el potencial, se sustituye el anterior  $E_\mu = 0$  por el nuevo

$$E_\nu = C_\nu \quad (4.6.1)$$

y se re-calcula con el potencial inicial la ecuación (4.3.3) los siguientes parámetros potenciales y de apantallamiento hasta lograr auto consistencia. La auto-consistencia parcial se realiza sobre cada orbital que se toma en cuenta en cada esfera atómica o vacía. Además, esta redistribuye la carga  $n_R^v(r)$  en las esferas a causa de cambiar  $E_\mu$  hasta llegar al valor  $E_\mu = C_\mu$ .

El resultado da bandas electrónicas correctas de segundo orden en  $(E - E_\mu)$  alrededor de los valores  $E_\mu$ . Aquí  $C_\mu$  describe el centro de gravedad de la banda total. Este método es adecuado para un potencial parametrizado, porque nos permite una primera visión de las bandas (con errores bien pequeños cerca de los centros de las bandas y errores grandes para energía lejos del centro de las bandas)



y nos permite establecer las regiones de interés. Con este método obtenemos para cada esfera  $R_i$  los parámetros potenciales y de apantallamiento

$$E_{\mu,R_i}; C_{\mu,R_i}; \delta_{\mu,R_i} \text{ y } Q_{\mu,R_i} \quad (4.6.2)$$

Con

$$\delta_{\mu,R_i} = (\Delta_{\mu,R_i})^{1/2}$$

Con los parámetros de apantallamiento  $Q_{\mu,R}^2$  [6] se calcula la matriz de estructura  $S^2(\mathbf{k})$  y finalmente se formula el Hamiltoniano  $H^2(\mathbf{k})$ . Este Hamiltoniano tiene la misma estructura como la matriz  $S^2(\mathbf{k})$ , en general es una matriz de 36x36 compleja y hermética.

#### 4.7.- La densidad de estados

Una vez formulado el Hamiltoniano  $H(\mathbf{k})$  en la respectiva base LMTO [6], se resuelve la ecuación

$$[ H^2(\bar{\mathbf{k}}) - \varepsilon_j(\bar{\mathbf{k}}) ] \bar{C}_j(\bar{\mathbf{k}}) = 0 \quad (4.7.1)$$

Siendo  $\mathbf{k}$  un vector de la primera zona de Brillouin (FBZ) de la estructura "diamante", que es la misma de la estructura cúbica de cara centrada FCC. A causa de las simetrías puntuales, la parte de la FBZ que tiene valores independientes para los valores propios  $\varepsilon_j(\mathbf{k})$  y los vectores propios  $C_j(\mathbf{k})$  se



reduce a la parte irreducible de la primera zona de Brillouin (IFBZ). La IFBZ de la estructura FCC está dada por

$$0 \leq k_z \leq k_x \leq k_y \leq 2\pi/a \quad (4.7.2)$$

$$k_x + k_y + k_z \leq 3\pi/a \quad (4.7.3)$$

Con  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  en coordenadas cartesianas y siendo  $a$  la constante de la red, el volumen de la IFBZ está dado por:

$$\Omega_{IFBZ} = \frac{\Omega_{FBZ}}{48} \quad (4.7.4)$$

Con el volumen de la parte irreducible de la primera zona de Brillouin (FBZ) dado por:

$$\Omega_{FBZ} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \quad (4.7.5)$$

Con:

$$\Omega = \frac{a^3}{4} \quad (4.7.6)$$

Es el volumen de la celda elemental de la estructura FCC. En el resto del volumen de la FBZ los valores de  $\epsilon_j(\mathbf{k})$  y  $C_j(\mathbf{k})$  se repiten de acuerdo a la simetría de la zona. La dirección cristalográfica de alta simetría  $\Gamma$ -X que corresponde a  $\mathbf{k}(100)$  está contenida en la IFBZ. Para las otras direcciones cristalográficas las bandas electrónicas se encuentran calculadas comúnmente en la literatura [18].



En presente trabajo calculamos las bandas electrónicas en la dirección (100) para todo  $k_x$  entre 0 y  $2\pi/a$ , es decir se calcula:

$$\varepsilon_j(k_x, 0, 0) \text{ y } \bar{C}_j(k_x, 0, 0) \text{ para } 0 \leq k_x \leq 2\pi/a \quad (4.7.7)$$

Para determinar la DOS parcial  $N_{RL}(\varepsilon)$  se requieren conocer los valores propios  $\varepsilon_j(\mathbf{k})$ , los vectores propios  $\alpha_{RL}(\mathbf{k})$  que son soluciones de la ecuación (4.3.3). Así:

$$N_{RL}(E) = \frac{48\Omega}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{IFBZ} d^3\bar{k} \alpha_{RL,j}(\bar{k}) \delta(E - \varepsilon_j(\bar{k})) \quad (4.7.8)$$

Siendo  $\Omega$  el volumen de la celda elemental. La densidad de estados total (DOS) se obtiene de:

$$N(E) = \frac{48\Omega}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{IFBZ} d^3\bar{k} \delta(E - \varepsilon_j(\bar{k})) \quad (4.7.9)$$

En estas ecuaciones (4.7.9) y (4.7.8) para la densidad de estados parcial y total, la función  $\delta$ -Dirac se puede ser transformar en una integral de superficie de energía constante [19], de manera que se puede escribir:

$$N_{RL}(E) = \frac{48\Omega}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{s_j(E)} \frac{\alpha_{RL,j}(\mathbf{k})}{|\Delta_k \varepsilon_j(\mathbf{k})|} ds \quad (4.7.10)$$

Y:

$$N(E) = \frac{48\Omega}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{s_j(E)} \frac{ds}{|\Delta_k \varepsilon_j(\mathbf{k})|} \quad (4.7.11)$$



En la que  $s_j(E)$  es la superficie de energía constante con  $E = E_j(\mathbf{k})$ . Con la DOS total y el número de electrones

$$n = \int_0^{E_F} dE N(E) \quad (4.7.12)$$

Se puede calcular la energía de Fermi  $E_F$  que se requiere para la formulación de la energía total.



## **V MATERIALES Y METODOS**

### **5.1 Materiales**

Dada la naturaleza básica de la presente investigación los materiales utilizados son:

- Una computadora personal (PC) Pentium 4, con sistema operativo e impresora.
- Lenguaje de programación FORTRAN 90 con compilador y sus librerías.
- Programas de Graficas en 2D: Gnuplot, Excel; etc.
- Libros de Física de Estado Solido y artículos de investigación publicados en revistas indexadas, tales como: Physical Review B, Physics State Solid, etc.
- Papel bond y materiales de oficina.

### **5.2 Métodos**

La metodología para la demostración la hipótesis del presente trabajo consiste en calcular la estructura electrónica y de esta, se determinará la región de energía prohibida (gap) del silicio en el estado fundamental. Para determinar la estructura electrónica debemos de resolver la ecuación de Schrödinger para un electrón en el sólido (fase cristalina) usando el método de los orbitales lineales muffin-tin (LMTO) de Hans L. Skriver [6], método que existe en la literatura.





También se requiere de conocer la solución ecuaciones diferenciales por el método de las diferencias finitas, así como de conocer métodos de integración y métodos de diagonalización de matrices.



## VI RESULTADOS

### 6.1 El potencial efectivo

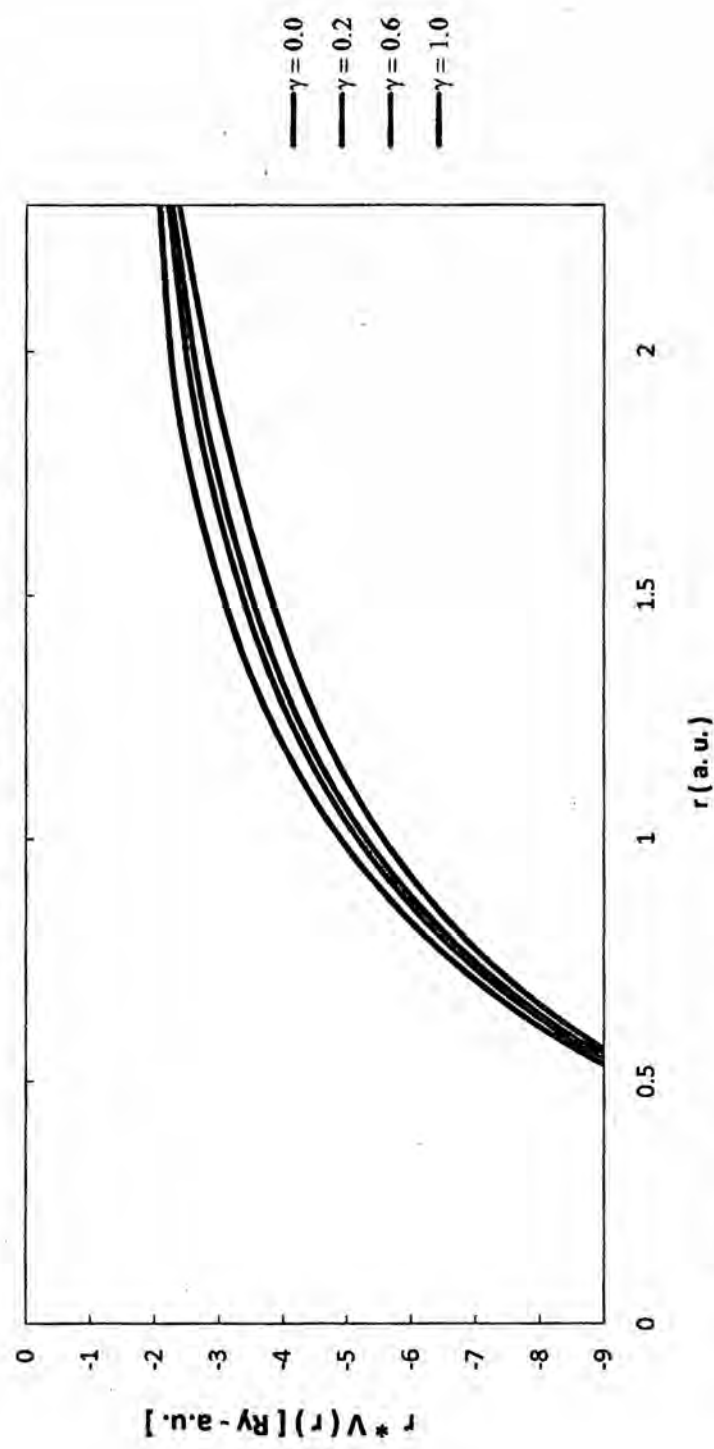
El trabajo se inicia con el cálculo en la aproximación LDA, del potencial efectivo tanto para las esferas atómicas de Si, como para las esferas vacías de la red cristalina. Los resultados del cálculo se dan en la Tabla N° 6.1 y Tabla N° 6.2

**TABLA N° 6.1**  
**EL POTENCIAL EFECTIVO – LDA, ESFERAS DE Si**

r (a. u.)	r * V (r) en Ry - a. u.					
	$\gamma = 0.0$	$\gamma = 0.2$	$\gamma = 0.4$	$\gamma = 0.6$	$\gamma = 0.8$	$\gamma = 1.0$
0.023	-26.197	-26.201	-26.205	-26.209	-26.209	-26.216
0.029	-25.806	-25.810	-25.815	-25.820	-25.820	-25.829
0.035	-25.338	-25.343	-25.349	-25.355	-25.355	-25.366
0.043	-24.784	-24.791	-24.797	-24.804	-24.804	-24.818
0.052	-24.135	-24.143	-24.152	-24.160	-24.160	-24.177
0.064	-23.384	-23.394	-23.404	-23.415	-23.415	-23.435
0.078	-22.524	-22.537	-22.549	-22.562	-22.562	-22.587
0.095	-21.550	-21.566	-21.581	-21.596	-21.596	-21.627
0.116	-20.456	-20.474	-20.493	-20.512	-20.512	-20.549
0.141	-19.235	-19.258	-19.281	-19.304	-19.304	-19.350
0.173	-17.894	-17.922	-17.950	-17.978	-17.978	-18.034
0.211	-16.448	-16.482	-16.516	-16.550	-16.550	-16.618
0.258	-14.911	-14.952	-14.994	-15.035	-15.035	-15.118
0.315	-13.293	-13.344	-13.394	-13.444	-13.444	-13.545
0.384	-11.631	-11.692	-11.753	-11.814	-11.814	-11.936
0.470	-9.996	-10.069	-10.143	-10.217	-10.217	-10.364
0.574	-8.462	-8.550	-8.639	-8.727	-8.727	-8.904
0.701	-7.066	-7.171	-7.276	-7.380	-7.380	-7.590
0.856	-5.798	-5.920	-6.042	-6.164	-6.164	-6.407
1.045	-4.654	-4.791	-4.928	-5.064	-5.064	-5.337
1.277	-3.690	-3.837	-3.984	-4.130	-4.130	-4.420
1.559	-2.917	-3.067	-3.216	-3.363	-3.363	-3.654
1.904	-2.330	-2.461	-2.591	-2.717	-2.717	-2.961
2.326	-2.054	-2.120	-2.182	-2.237	-2.237	-2.323

Fuente: Resultados de la presente investigación

**GRAFICA N° 6.1**  
**Potencial Efectivo - LDA en las Esferas de Si**



Fuente: Resultados de la presente investigación.

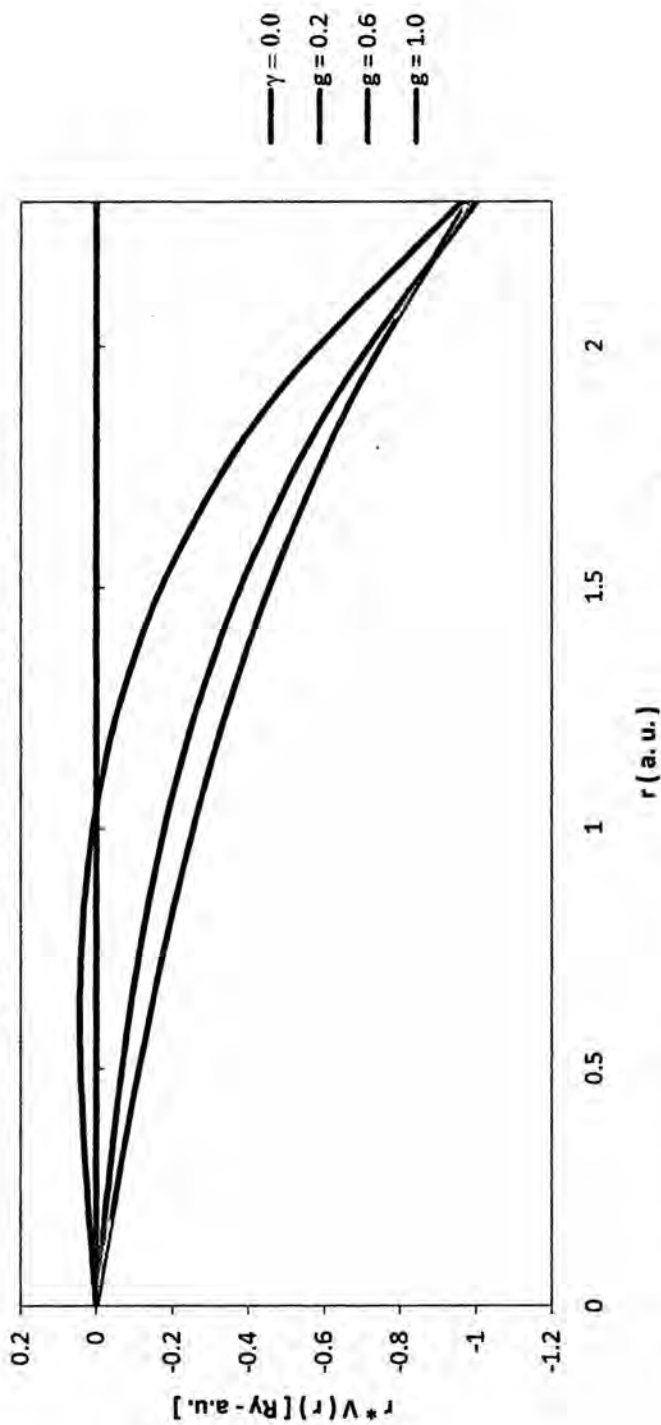
**TABLA N° 6.2**  
**EL POTENCIAL EFECTIVO LDA, ESFERAS VACIAS**

r (a. u.)	r * V ( r ) en Ry - a. u.					
	$\gamma = 0.0$	$\gamma = 0.2$	$\gamma = 0.4$	$\gamma = 0.6$	$\gamma = 0.8$	$\gamma = 1.0$
0.016	0.000	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002	0.002
0.019	0.000	-0.005	-0.004	-0.002	-0.002	0.002
0.023	0.000	-0.007	-0.005	-0.003	-0.003	0.003
0.029	0.000	-0.008	-0.006	-0.003	-0.003	0.003
0.035	0.000	-0.010	-0.007	-0.004	-0.004	0.004
0.043	0.000	-0.012	-0.009	-0.005	-0.005	0.005
0.052	0.000	-0.015	-0.011	-0.006	-0.006	0.006
0.064	0.000	-0.018	-0.014	-0.008	-0.008	0.007
0.078	0.000	-0.022	-0.017	-0.009	-0.009	0.008
0.095	0.000	-0.027	-0.020	-0.011	-0.011	0.010
0.116	0.000	-0.032	-0.025	-0.014	-0.014	0.012
0.141	0.000	-0.040	-0.030	-0.017	-0.017	0.015
0.173	0.000	-0.048	-0.037	-0.021	-0.021	0.018
0.211	0.000	-0.059	-0.046	-0.026	-0.026	0.022
0.258	0.000	-0.073	-0.056	-0.032	-0.032	0.026
0.315	0.000	-0.089	-0.069	-0.039	-0.039	0.031
0.384	0.000	-0.109	-0.085	-0.049	-0.049	0.036
0.470	0.000	-0.134	-0.105	-0.062	-0.062	0.041
0.574	0.000	-0.164	-0.130	-0.079	-0.079	0.044
0.701	0.000	-0.203	-0.164	-0.104	-0.104	0.042
0.856	0.000	-0.252	-0.208	-0.139	-0.139	0.031
1.045	0.000	-0.315	-0.269	-0.192	-0.192	0.001
1.277	0.000	-0.399	-0.356	-0.276	-0.276	-0.067
1.559	0.000	-0.512	-0.485	-0.411	-0.411	-0.206
1.904	0.000	-0.671	-0.683	-0.638	-0.638	-0.478
2.326	0.000	-0.902	-0.999	-1.026	-1.026	-0.996

Fuente: Resultados de la presente investigación



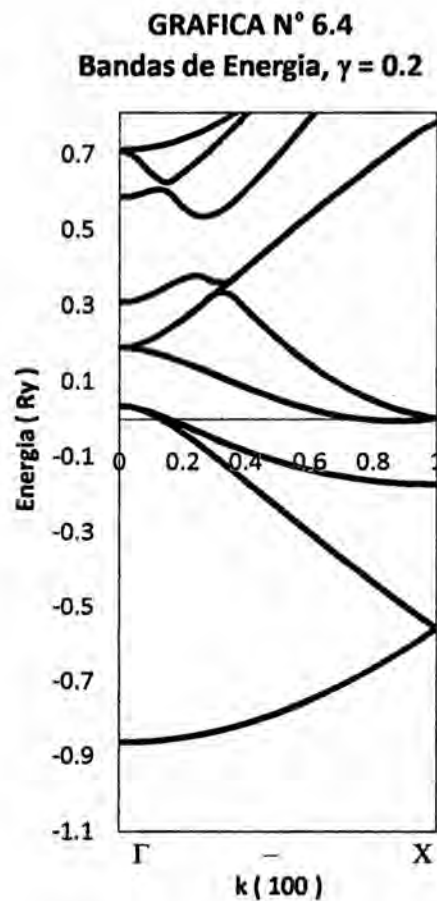
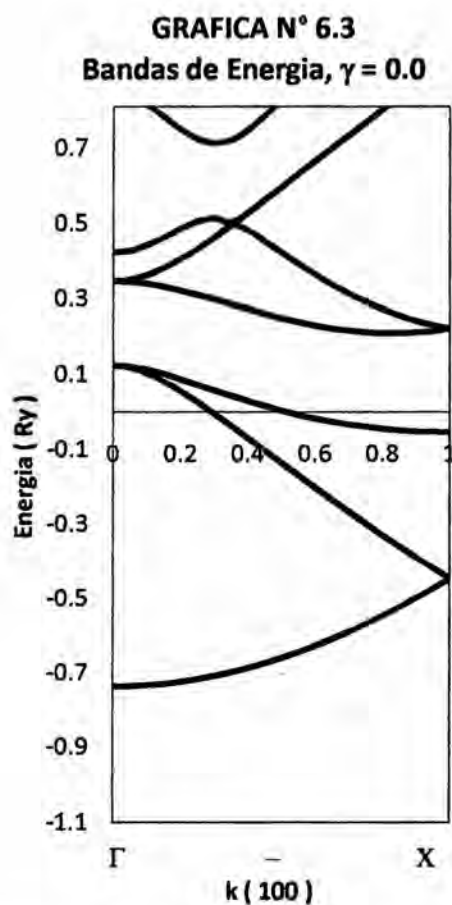
**GRAFICA N° 6.2**  
**Potencial Efectivo LDA, Esferas-Vacias**



Fuente: Resultados de la presente investigación.

## 6.2 La estructura de las bandas de energía

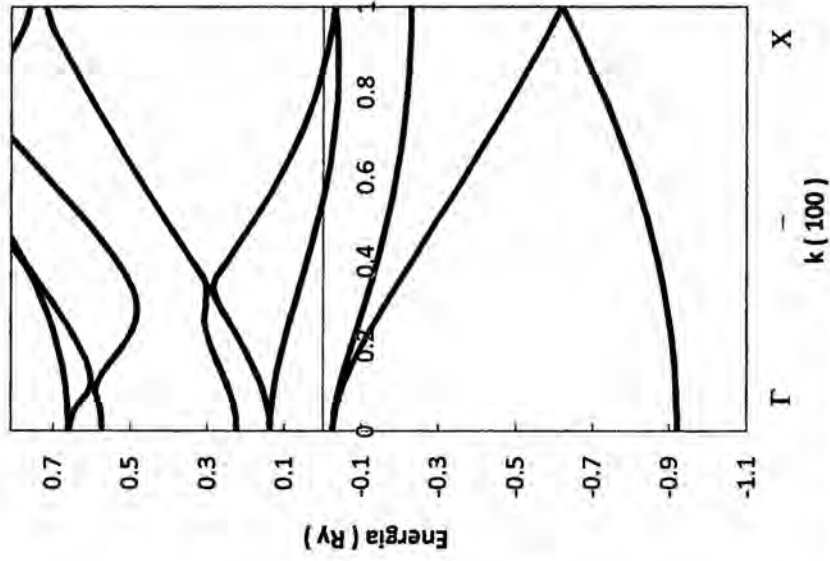
El potencial efectivo y el método LMTO permite resolver la ecuación de Kohn-Sham y de esta forma se obtienen diferentes bandas de energía del sistema. Los resultados del cálculo de las bandas de energía en la dirección cristalográfica  $\Gamma - X$  de alta simetría se muestran en las graficas a continuación para algunos valores del parámetro ( $\gamma$ ) de transferencia de carga a la red cristalina del sólido.



Fuente: Resultados de la presente investigación

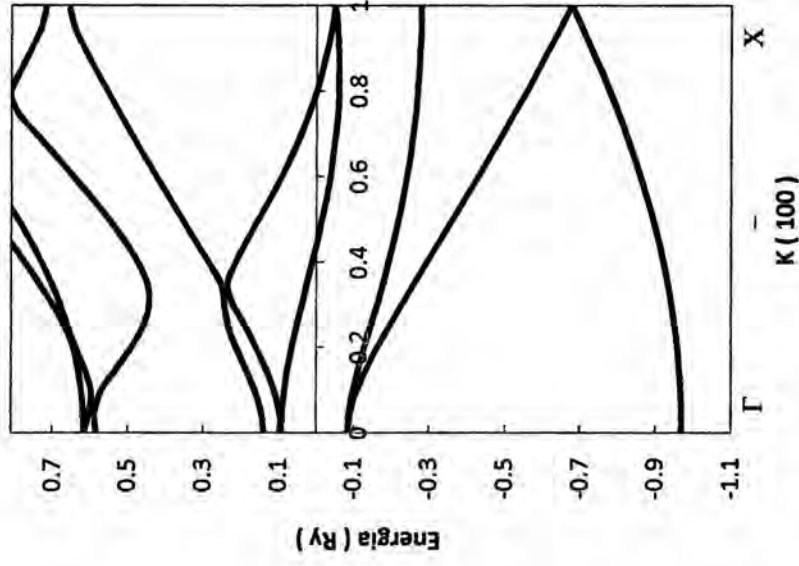
Fuente: Resultados de la presente investigación

**GRAFICA N° 6.5**  
**Bandas de Energía,  $\gamma = 0.4$**



Fuente: Resultados de la presente investigación

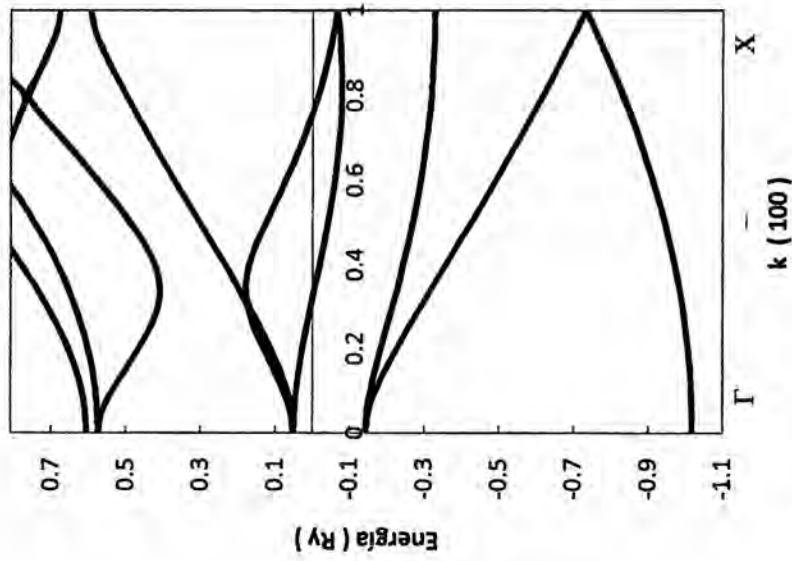
**GRAFICA N° 6.6**  
**Bandas de Energía  $\gamma = 0.6$**



Fuente: Resultados de la presente investigación

**GRAFICA N° 6.7**

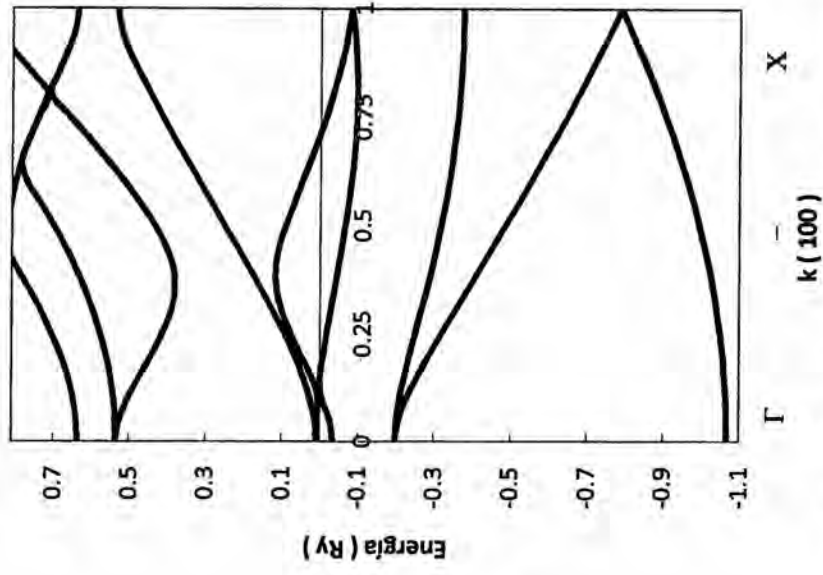
**Bandas de Energía,  $\gamma = 0.8$**



Fuente: Resultados de la presente investigación

**GRAFICA N° 6.8**

**Bandas de Energía,  $\gamma = 1.0$**



Fuente: Resultados de la presente investigación



En la Tabla N° 6.3, se muestran los valores de las bandas de energía con 0.0% de transferencia de carga a la red cristalina, lo que corresponde  $\gamma = 0.0$ , calculados en la dirección cristalográfica de alta simetría  $\Gamma - X$ , lo que corresponde a  $k(100)$

**TABLA N° 6.3**  
**LAS BANDAS DE ENERGÍA, PARA  $\gamma = 0.0$**

Bandas de Energía del Silicio para $\gamma = 0.0$ (dirección cristalográfica $\Gamma - X$ )									
Energía ( Ry )									
k (100)	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7	n = 8	n = 9
0	-0.736	0.124	0.124	0.124	0.347	0.347	0.347	0.423	0.850
0.05	-0.736	0.119	0.121	0.121	0.345	0.351	0.351	0.428	0.840
0.1	-0.733	0.104	0.113	0.113	0.340	0.363	0.363	0.443	0.816
0.15	-0.729	0.082	0.101	0.101	0.333	0.382	0.382	0.464	0.783
0.2	-0.724	0.056	0.088	0.088	0.323	0.406	0.406	0.486	0.750
0.25	-0.717	0.026	0.073	0.073	0.311	0.433	0.433	0.505	0.724
0.3	-0.709	-0.005	0.058	0.058	0.299	0.463	0.463	0.513	0.713
0.35	-0.699	-0.037	0.043	0.043	0.286	0.495	0.495	0.504	0.722
0.4	-0.687	-0.070	0.029	0.029	0.274	0.482	0.528	0.528	0.749
0.45	-0.675	-0.103	0.016	0.016	0.261	0.454	0.562	0.562	0.786
0.5	-0.660	-0.136	0.004	0.004	0.250	0.423	0.597	0.597	0.829
0.55	-0.645	-0.169	-0.007	-0.007	0.240	0.394	0.632	0.632	0.876
0.6	-0.628	-0.202	-0.017	-0.017	0.231	0.365	0.666	0.666	0.925
0.65	-0.609	-0.234	-0.025	-0.025	0.223	0.338	0.701	0.701	0.975
0.7	-0.589	-0.266	-0.033	-0.033	0.217	0.314	0.735	0.735	1.026
0.75	-0.568	-0.298	-0.039	-0.039	0.213	0.293	0.769	0.769	1.078
0.8	-0.546	-0.329	-0.045	-0.045	0.211	0.273	0.803	0.803	1.059
0.85	-0.522	-0.359	-0.049	-0.049	0.210	0.257	0.836	0.836	1.030
0.9	-0.498	-0.389	-0.051	-0.051	0.212	0.243	0.868	0.868	1.000
0.95	-0.472	-0.417	-0.053	-0.053	0.216	0.232	0.900	0.900	0.970
1	-0.445	-0.445	-0.054	-0.054	0.223	0.223	0.921	0.921	0.949

Fuente: Resultados de la presente investigación

En la Tabla N° 6.4, se muestran los valores de las bandas de energía con 100% de transferencia de carga a la red cristalina, lo que corresponde  $\gamma = 1.0$ , calculados en la dirección cristalográfica de alta simetría  $\Gamma-X$  lo que corresponde a  $k(100)$ .

**TABLA N° 6.4**  
**LAS BANDAS DE ENERGÍA, PARA  $\gamma= 1.0$**

Bandas de Energía del Silicio para $\gamma = 1.0$ (dirección cristalográfica $\Gamma - X$ )									
Energía ( Ry )									
k (100)	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7	n = 8	n = 9
0	-1.068	-0.199	-0.199	-0.199	-0.034	0.009	0.009	0.009	0.535
0.05	-1.067	-0.207	-0.202	-0.202	-0.026	0.008	0.014	0.014	0.527
0.1	-1.065	-0.228	-0.210	-0.210	-0.005	0.004	0.026	0.026	0.504
0.15	-1.061	-0.256	-0.222	-0.222	-0.001	0.022	0.044	0.044	0.474
0.2	-1.056	-0.287	-0.236	-0.236	-0.009	0.051	0.068	0.068	0.442
0.25	-1.049	-0.319	-0.250	-0.250	-0.017	0.078	0.094	0.094	0.413
0.3	-1.041	-0.352	-0.265	-0.265	-0.027	0.101	0.123	0.123	0.391
0.35	-1.032	-0.386	-0.280	-0.280	-0.037	0.115	0.154	0.154	0.381
0.4	-1.021	-0.420	-0.293	-0.293	-0.047	0.117	0.186	0.186	0.385
0.45	-1.008	-0.453	-0.306	-0.306	-0.057	0.108	0.218	0.218	0.405
0.5	-0.995	-0.486	-0.318	-0.318	-0.066	0.091	0.252	0.252	0.435
0.55	-0.980	-0.519	-0.329	-0.329	-0.074	0.070	0.285	0.285	0.473
0.6	-0.963	-0.552	-0.339	-0.339	-0.081	0.048	0.318	0.318	0.515
0.65	-0.945	-0.584	-0.347	-0.347	-0.087	0.026	0.351	0.351	0.561
0.7	-0.926	-0.615	-0.355	-0.355	-0.091	0.005	0.384	0.384	0.609
0.75	-0.906	-0.646	-0.361	-0.361	-0.094	-0.014	0.415	0.415	0.659
0.8	-0.885	-0.676	-0.366	-0.366	-0.095	-0.031	0.446	0.446	0.709
0.85	-0.862	-0.705	-0.370	-0.370	-0.095	-0.047	0.476	0.476	0.691
0.9	-0.839	-0.734	-0.373	-0.373	-0.092	-0.060	0.503	0.503	0.666
0.95	-0.814	-0.761	-0.374	-0.374	-0.087	-0.071	0.524	0.524	0.646
1	-0.788	-0.788	-0.375	-0.375	-0.080	-0.080	0.533	0.533	0.638

Fuente: Resultados de la presente investigación

### 6.3 La densidad de estados

Usando los parámetros potenciales y el método LMTO, se pueden calcular la densidad de estados  $N(\epsilon)$  en función de la energía. Los resultados para algunos valores del parámetro de transferencia  $\gamma$  se muestran a continuación.

**TABLA N° 6.5**  
**LA DENSIDAD DE ESTADOS DOS, PARA  $\gamma = 0.0$**

Densidad de Estados $N(\epsilon)$ del Si obtenidos para $\gamma = 0.0$							
La energía $\epsilon$ en Ry							
$\epsilon$	$N(\epsilon)$	$\epsilon$	$N(\epsilon)$	$\epsilon$	$N(\epsilon)$	$\epsilon$	$N(\epsilon)$
-0.757	0.000	-0.471	4.982	-0.186	2.963	0.100	1.561
-0.743	1.107	-0.457	2.966	-0.171	2.658	0.114	0.000
-0.729	2.275	-0.443	0.956	-0.157	2.375	0.129	0.000
-0.714	2.945	-0.429	1.236	-0.143	6.320	0.143	0.000
-0.700	3.736	-0.414	2.883	-0.129	17.916	0.157	0.000
-0.686	4.242	-0.400	4.881	-0.114	17.393	0.171	0.000
-0.671	4.871	-0.386	7.813	-0.100	16.325	0.186	0.000
-0.657	5.460	-0.371	8.505	-0.086	15.786	0.200	0.000
-0.643	6.049	-0.357	21.694	-0.071	17.472	0.214	0.000
-0.629	6.781	-0.343	13.959	-0.057	20.189	0.229	0.000
-0.614	7.599	-0.329	11.168	-0.043	26.883	0.243	1.210
-0.600	8.665	-0.314	8.996	-0.029	24.705	0.257	4.454
-0.586	10.263	-0.300	7.501	-0.014	24.446	0.271	5.562
-0.571	12.062	-0.286	6.543	0.000	23.729	0.286	7.285
-0.557	11.329	-0.271	5.777	0.014	22.889	0.300	9.036
-0.543	10.483	-0.257	5.121	0.029	23.136	0.314	11.298
-0.529	9.779	-0.243	4.548	0.043	14.730	0.329	17.276
-0.514	8.562	-0.229	4.049	0.057	9.735	0.343	24.756
-0.500	8.090	-0.214	3.645	0.071	6.581	0.357	24.970
-0.486	7.396	-0.200	3.293	0.086	4.393	0.371	20.823

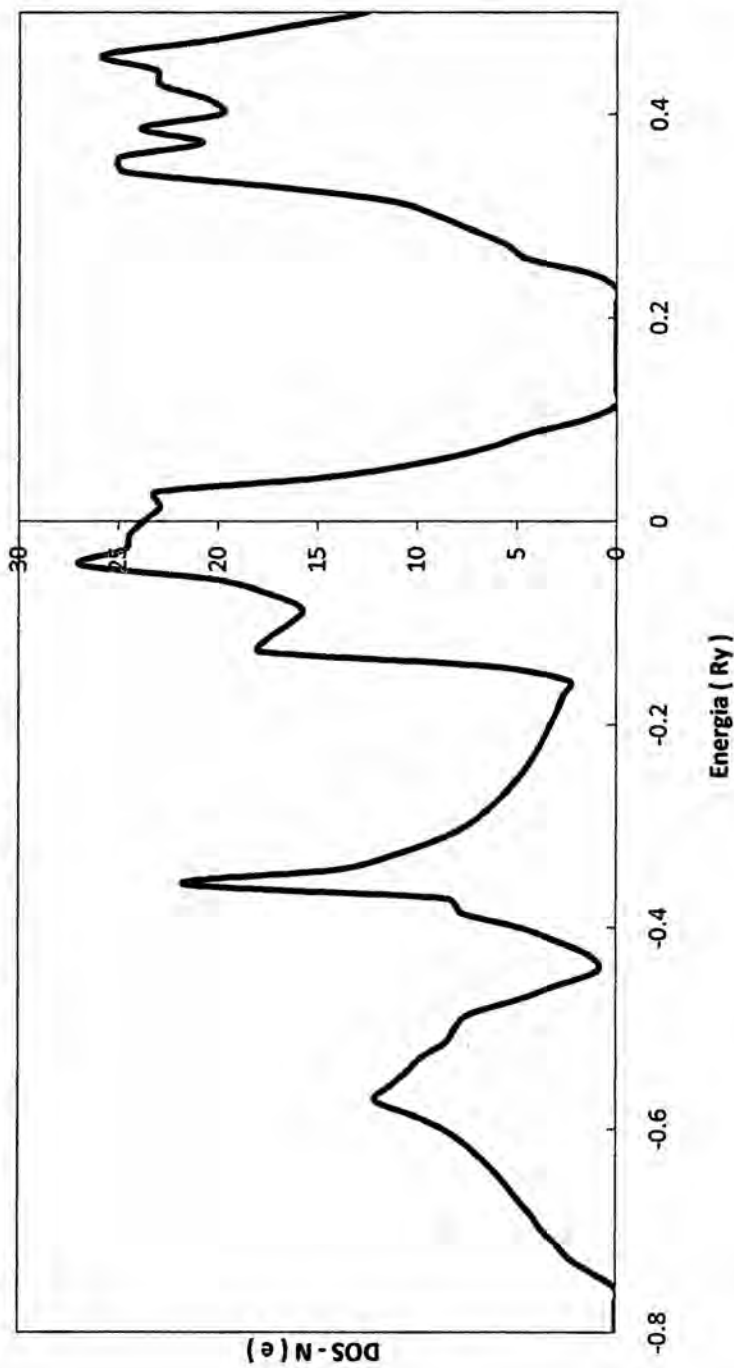
Fuente: Resultados de la presente investigación.

**TABLA N° 6.6**  
**LA DENSIDAD DE ESTADOS DOS, PARA  $\gamma = 1.0$**

Densidad de Estados $N(\epsilon)$ del Si obtenidos para $\gamma = 1.0$							
La energía $\epsilon$ en Ry							
$\epsilon$	$N(\epsilon)$	$\epsilon$	$N(\epsilon)$	$\epsilon$	$N(\epsilon)$	$\epsilon$	$N(\epsilon)$
-1.100	0.000	-0.743	5.554	-0.386	20.509	-0.029	23.754
-1.086	0.000	-0.729	8.754	-0.371	28.071	-0.014	24.643
-1.071	1.512	-0.714	8.366	-0.357	26.047	0.000	24.630
-1.057	2.643	-0.700	11.343	-0.343	26.389	0.014	22.838
-1.043	3.308	-0.686	15.038	-0.329	25.155	0.029	20.686
-1.029	4.071	-0.671	11.713	-0.314	24.021	0.043	19.399
-1.014	4.685	-0.657	9.344	-0.300	23.789	0.057	17.893
-1.000	5.467	-0.643	7.743	-0.286	14.254	0.071	27.877
-0.986	6.072	-0.629	6.667	-0.271	9.215	0.086	27.929
-0.971	6.833	-0.614	5.837	-0.257	6.209	0.100	23.463
-0.957	7.773	-0.600	5.130	-0.243	3.990	0.114	21.115
-0.943	8.875	-0.586	4.529	-0.229	1.551	0.129	16.584
-0.929	10.608	-0.571	4.029	-0.214	0.000	0.143	13.642
-0.914	12.701	-0.557	3.627	-0.200	0.000	0.157	13.663
-0.900	12.006	-0.543	3.256	-0.186	0.000	0.171	20.101
-0.886	11.025	-0.529	2.912	-0.171	0.000	0.186	17.596
-0.871	10.291	-0.514	2.597	-0.157	0.000	0.200	17.865
-0.857	8.908	-0.500	2.308	-0.143	0.000	0.214	19.761
-0.843	8.511	-0.486	2.075	-0.129	0.000	0.229	14.612
-0.829	7.368	-0.471	1.860	-0.114	0.000	0.243	13.678
-0.814	4.728	-0.457	9.330	-0.100	1.272	0.257	14.915
-0.800	2.707	-0.443	21.262	-0.086	4.893	0.271	17.420
-0.786	0.500	-0.429	17.718	-0.071	6.283	0.286	19.212
-0.771	1.687	-0.414	16.639	-0.057	9.283	0.300	17.196
-0.757	3.366	-0.400	17.397	-0.043	14.273	0.314	17.355

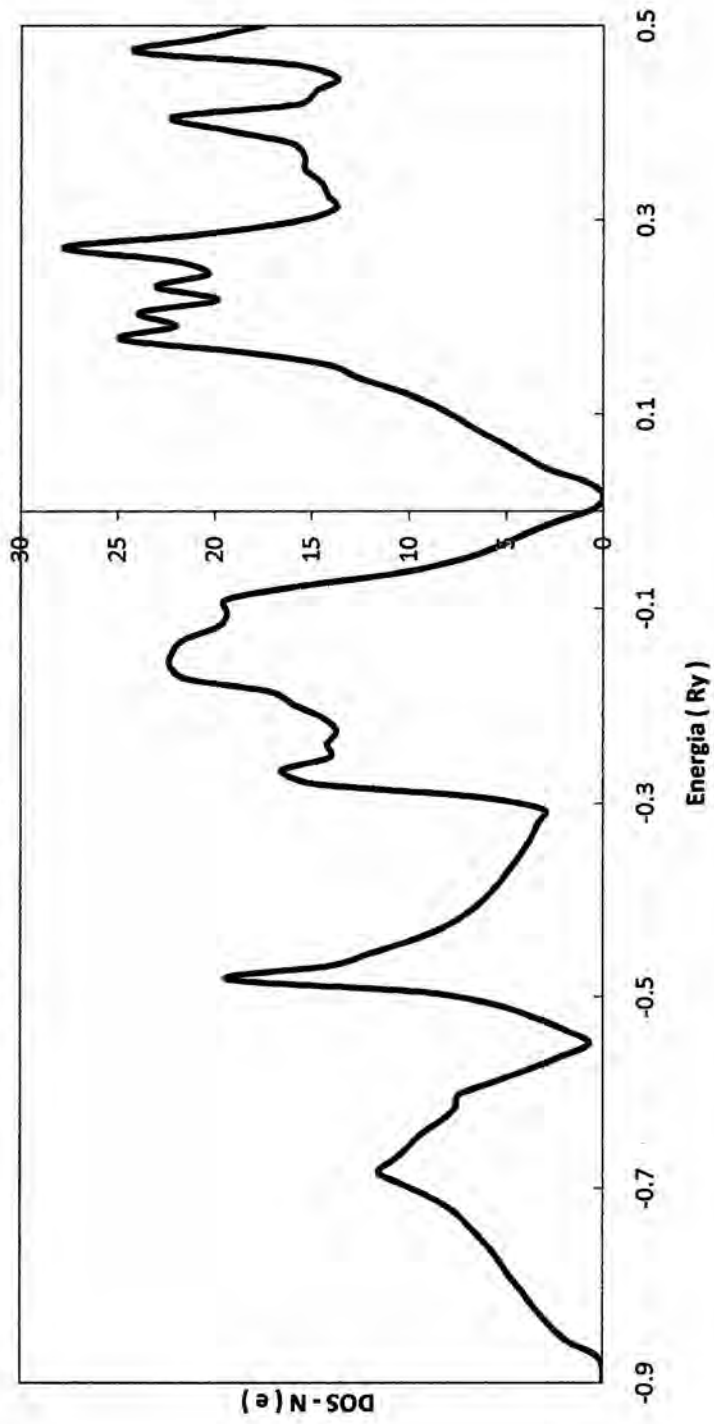
Fuente: Resultados de la presente investigación.

**GRAFICA N° 6.9**  
**La Densidad de Estados DOS- N(e), Para  $\gamma = 0.0$**



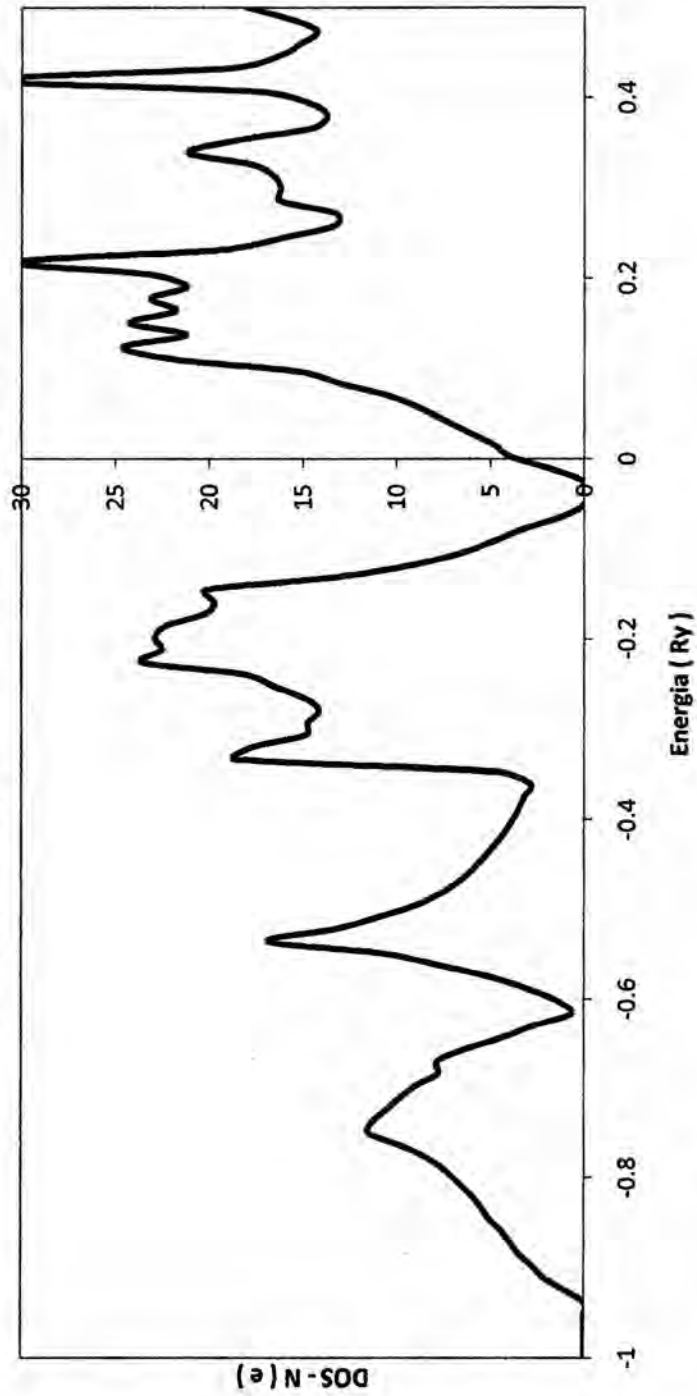
Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación, transferencia mínima de carga a las esferas vacías

**GRAFICA N° 6.10**  
**La Densidad de Estados DOS-N(e),  $\gamma = 0.2$**



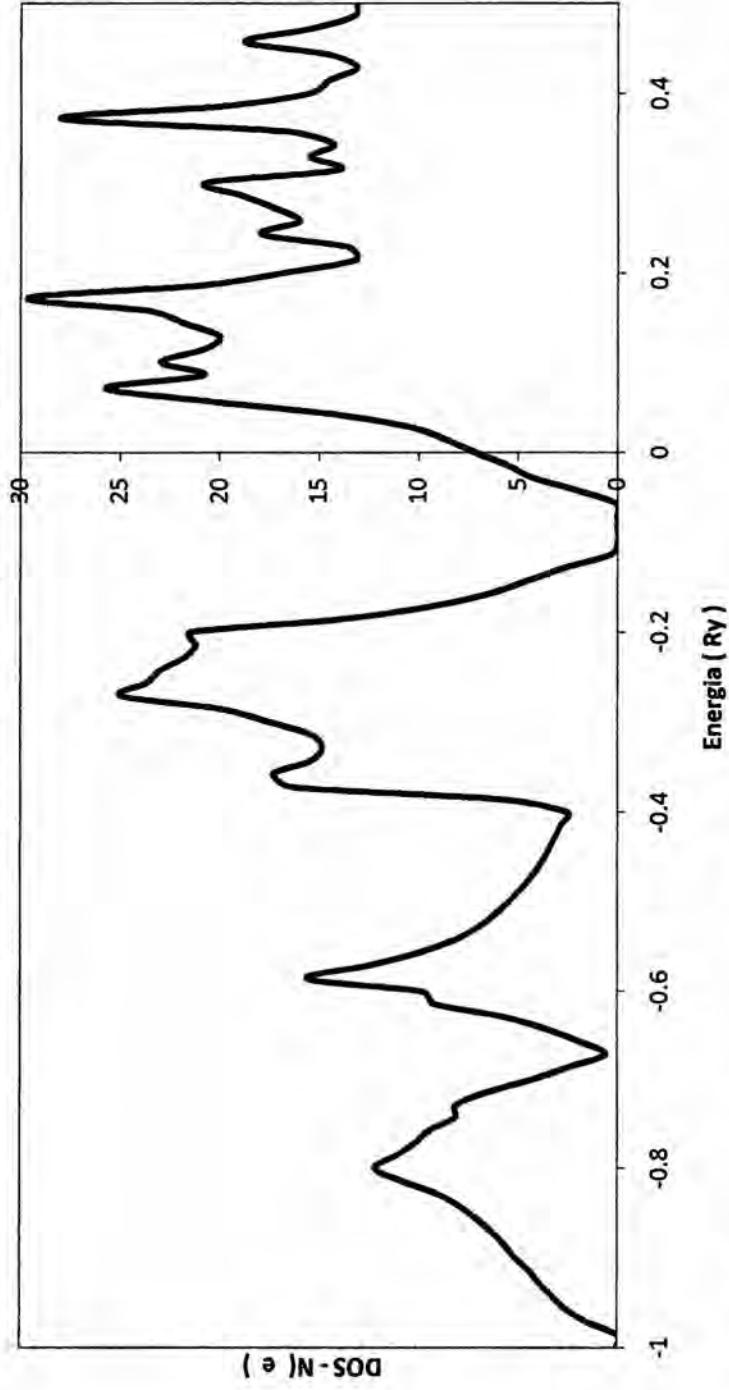
Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación, transferencia de 20% de carga a las esferas vacías

**GRAFICA N° 6.11**  
**La Densidad de Estados DOS-N(e),  $\gamma = 0.4$**



Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación, transferencia de 40% de carga a las esferas vacías

**GRAFICA N° 6.12**  
**La Densidad de Estados DOS-N(e),  $\gamma = 0.6$**

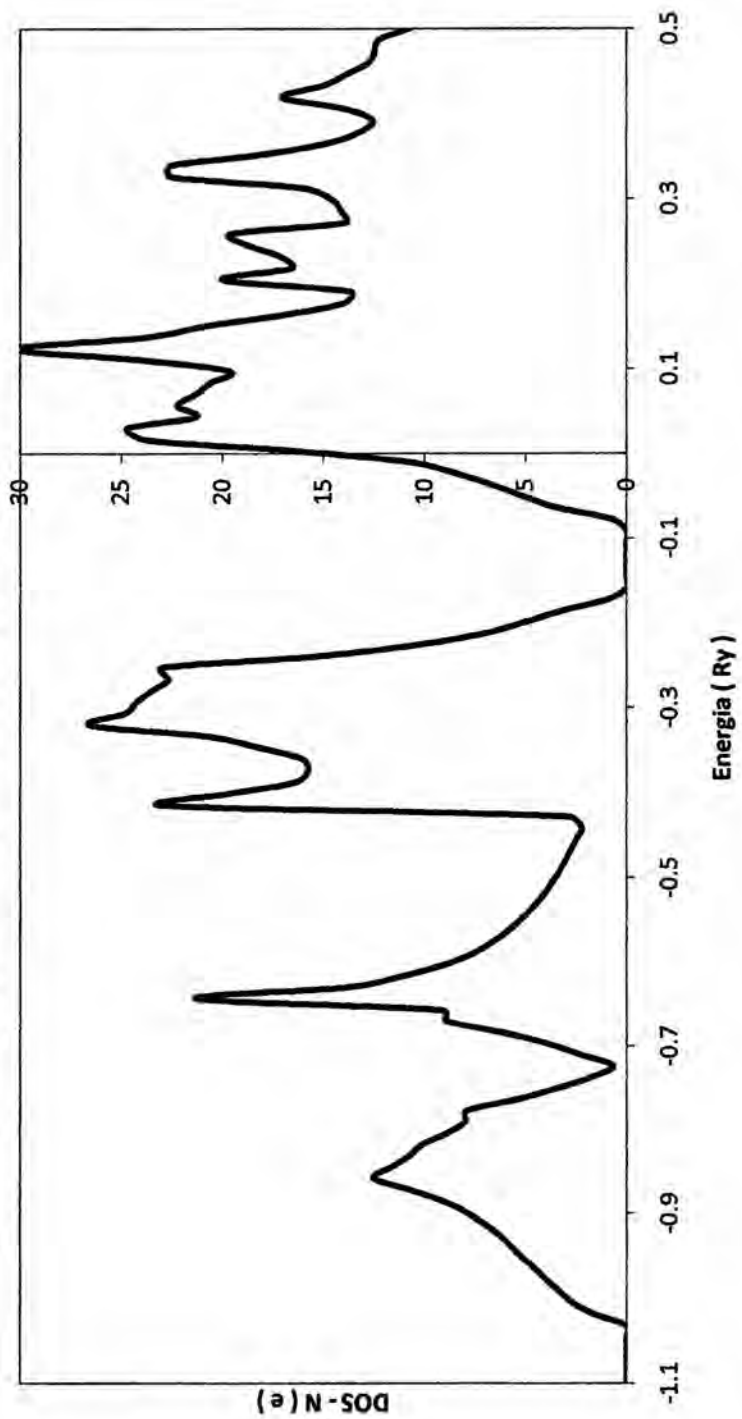


*[Handwritten signature]*

Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación, transferencia de 60% de carga a las esferas vacías

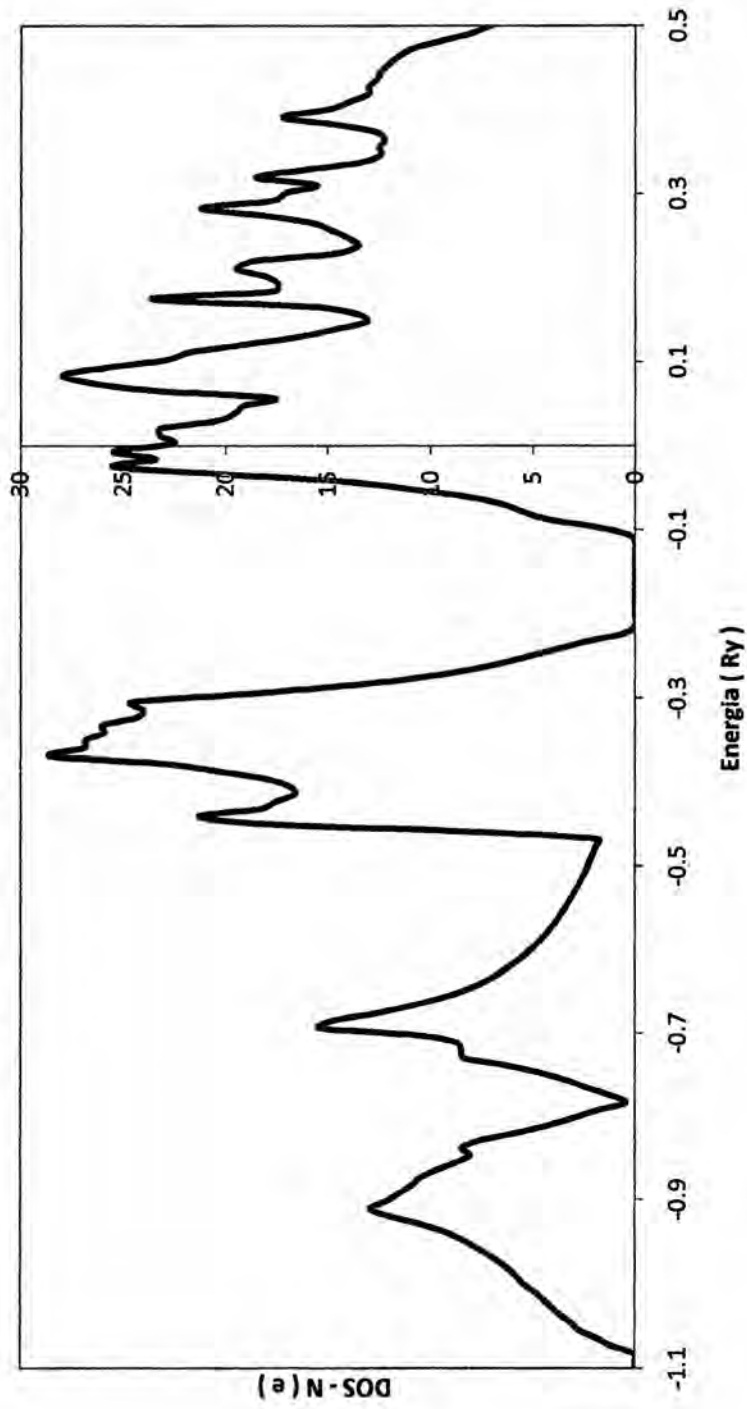


**GRAFICA N° 6.13**  
**La Densidad de Estados DOS-N(e),  $\gamma = 0.8$**



Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación, transferencia de 80% de carga a las esferas vacías

**GRAFICA N° 6.14**  
**La Densidad de Estados DOS-N(e),  $\gamma = 1.0$**



*[Handwritten signature]*

Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación, transferencia de 100% de carga a las esferas vacías

#### 6.4 La energía prohibida

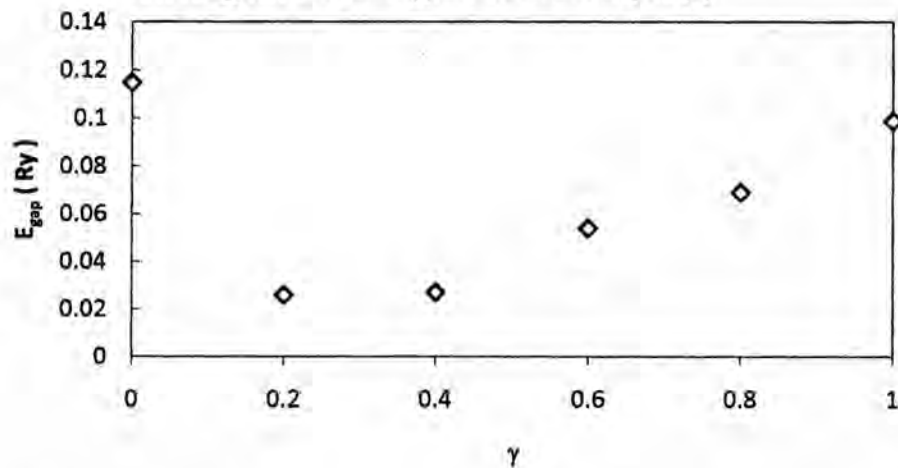
La densidad de estados no permite determinar la región de energía prohibida. Los resultados para algunos valores del parámetro  $\gamma$ , de transferencia de carga electrónica a la red se muestran en la siguiente tabla.

**TABLA N° 6.7**  
**LA ENERGÍA PROHIBIDA**

$\gamma$		0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$E_{\text{gap}}$	(Ry)	0.115	0.026	0.027	0.054	0.069	0.099
	(eV)	1.564	0.36	0.367	0.734	0.938	1.351

Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación.

**GRAFICA N° 6.15**  
**La Region de Energia Prohibida (Gap)**



Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación. Obtenida con la densidad de estados del silicio calculados en la aproximación LDA con el método LMTO.

## 6.5 La energía total

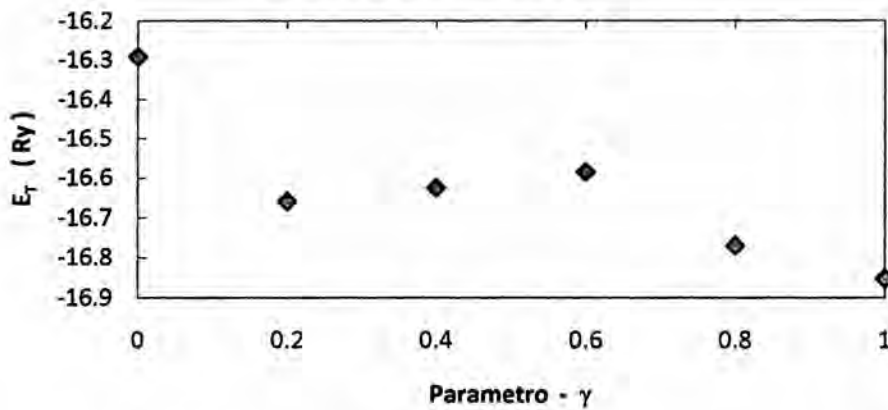
Los resultados para la energía total del sistema, obtenidos en la aproximación LDA y con el método LMTO, se han calculado para algunos valores del parámetro de transferencia de carga a la red. Estos se muestran en la tabla a continuación.

**TABLA N° 6.8  
LA ENERGÍA TOTAL**

$\gamma$		0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$E_{\text{gap}}$	(Ry)	-16.291	-16.658	-16.624	-16.584	-16.769	-16.852
	(eV)	-221.56	-226.55	-226.09	-225.54	-228.06	-229.19
$E_{\text{fermí}}$	(Ry)	-0.114	-0.016	-0.051	-0.1	-0.159	-0.214
	(eV)	-1.55	-0.217	-0.694	-1.36	-2.16	-2.91

Fuente: Resultados de la presente investigación para la energía total  $E_T$ , la energía de Fermi  $E_F$  calculados con el método LMTO en función del parámetro  $\gamma$ .

**GRAFICA N° 6.16  
La Energía Total  $E_T$  del Si**



Fuente: Resultados de la presente investigación para la energía total calculados en la aproximación LDA usando el método LMTO.

## VII DISCUSION

### 7.1 El potencial efectivo

El primer paso para estudiar la región de energía prohibida (gap) del silicio es la de calcular el potencial efectivo en la aproximación LDA para las esferas atómicas de silicio y para las esferas vacías ubicadas en la región de menor ocupación de la red a lo largo de la diagonal del cristal, potencial que está dado por la ecuación (4.4.1).

Los resultados del cálculo del potencial para las esferas atómicas de silicio que se aprecian en la GRAFICA N° 6.1 de la pagina 34, muestran que el potencial efectivo resulta energéticamente más profundo, para una máxima transferencia de carga electrónica a la red cristalina (esto es con  $\gamma = 1.0$ ), que el mismo potencial efectivo para una mínima transferencia de carga electrónica a la red cristalina (esto es con  $\gamma = 0.0$ ).

Los resultados del cálculo del potencial para las esferas vacías, que se aprecian en la GRAFICA N° 6.2 de la pagina 36, muestra que el potencial resulta energéticamente más profundo para una máxima transferencia (esto es con  $\gamma = 1.0$ ) de la carga electrónica, que el potencial para las esferas vacías con una mínima transferencia (esto es con  $\gamma = 0.0$ ) de carga electrónica a estas esferas.

### 7.2 Las bandas de energía

Con este potencial efectivo ya calculado se ha resuelto la ecuación de Schrödinger, lo que nos ha permitido obtener la relación de dispersión  $\epsilon = \epsilon(\vec{k})$



que técnicamente constituye la estructura de las bandas de energía del sistema, esto se ha repetido para algunos valores del parámetro  $\gamma$  entre 0 y 1.

Los resultados para una mínima transferencia de carga ( $\gamma = 0$ ) a la red cristalina se aprecian en la GRAFICA N° 6.3 en la página 37, en esta se observa un excelente perfil para la estructura de las bandas de energía en la dirección cristalográfica  $\Gamma - X$ , esto es para el vector de onda  $\vec{k} = (1,0,0)$ . Esta grafica presenta una estructura de bandas con una región de energía prohibida indirecta o gap indirecto), que queda justo por encima del tope de la banda de valencia que está ubicada en el punto  $\Gamma_{25}$  con un valor de energía de 0.124 Ry y la banda de conducción cerca del punto X con un valor de energía de 0.0223 Ry.

Esta región de energía prohibida está orientada hacia valores positivos de energía, tal como se puede apreciar en los resultados que se muestran en esta GRAFICA N° 6.3 de la pagina 37.

En la GRAFICA N° 6.4 de la pagina 37, se aprecia las bandas de energía calculadas con una transferencia del 20% (con  $\gamma = 0.2$ ) de la carga electrónica que esta fuera de la esfera atómica, a las esferas vacías en la red cristalina.

Estos resultados muestran un corrimiento de las bandas de valencia hacia valores superiores y consecuentemente la región de energía prohibida desaparece para este porcentaje de la transferencia de la carga electrónica a la red, lo que implicaría que el sistema pierda su carácter de material semiconductor.

Sin embargo esto empieza a cambiar conforme se aumenta la transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red, tal como se pueden apreciar en los resultados para la estructura de las bandas de energía obtenidos con los valores del

parámetro de transferencia  $\gamma = 0.4$ ;  $\gamma = 0.6$  y  $\gamma = 0.8$ , que se muestran en la GRAFICA N° 6.5 de la pagina 38; la GRAFICA N° 6.6 en la página 38, y GRAFICA N° 6.7 en la página 39. En estas graficas mencionadas, se puede observar un corrimiento hacia valores inferiores de energía (más negativos) de las bandas de valencia y consecuentemente se origina un pequeño gap entre la banda de banda valencia y la banda de conducción, con una tendencia a aumentar de magnitud.

En la GRAFICA N° 6.8 en la página 39, se muestran los resultados de la estructura de las bandas de energía obtenidos con el parámetro  $\gamma = 1.0$ , lo que implica una transferencia del 100% de la carga electrónica que reside fuera de las esferas atómicas hacia las esferas vacías de la red cristalina.

En la grafica se aprecia el desplazamiento de la estructura de bandas hacia valores negativos más profundos de energía, con valores para los puntos de alta simetría  $\Gamma_1 = -1.07 \text{ Ry}$  y  $\Gamma_{25} = -0.199 \text{ Ry}$  y con estos un mayor corrimiento hacia valores negativos de la banda de valencia, consecuentemente una región de energía prohibida indirecta y de mayor ancho entre la banda de valencia en el punto  $\Gamma_{25} = -0.199 \text{ Ry}$  y la banda de conducción ubicada cerca del punto de alta simetría en  $X = -0.08 \text{ Ry}$ .

Los resultados muestran una excelente estructura de las bandas de energía para esta máxima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, puesto que presenta el perfil característico para este material obtenidos con otros métodos.



### 7.3 La densidad de estados

Los resultados del cálculo de la densidad de estados (DOS) obtenidos para una mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, que corresponde a  $\gamma = 0.0$ , se muestran en la GRAFICA N° 6.9 en la página 44. En esta grafica se aprecia una DOS con una región de energía prohibida entre los estados de valencia (con tope en el punto  $\epsilon = 0.115$  Ry) y los estados de conducción (con el mínimo en el punto  $\epsilon = 0.228$  Ry).

Además se observa que esta región de energía prohibida está desplazada hacia los valores superiores (positivos) de energía, con un perfil típico de la densidad de estados para este sistema obtenidos con otros métodos.

La GRAFICA N° 6.10 en la página 45, muestra la densidad de estados obtenidos para un 20% de transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red, que corresponde a  $\gamma = 0.2$ . En esta grafica se aprecia una densidad de estados con una región de energía prohibida prácticamente nula, puesto que el tope de los estados de valencia que está en el punto  $\epsilon = 0.002$  Ry, es seguido del mínimo de los estados de conducción del sistema ubicado en el punto  $\epsilon = 0.016$  Ry.

Los resultados que se aprecian en la GRAFICA N° 6.11 de la página 46, en la GRAFICA N° 6.12 de la pagina 47 y en la GRAFICA N° 6.13 de la página 48, se muestran la densidad de estados obtenidos con un 40%, un 60% y un 80% de transferencia de la carga electrónica, fuera de las esferas atómicas, a las esferas vacías en la red cristalina.

En estos resultados se aprecia un desplazamiento de los estados de valencia hacia valores inferiores (negativos) de energía, con una región de energía prohibida bien



definida, cuya magnitud presenta una ligera tendencia a incrementarse de valor conforme aumenta la transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina.

La GRAFICA N° 6.14 en la página 49, muestra los resultados de la densidad de estados para una máxima transferencia (100%) de la carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina.

Se observa un máximo desplazamiento de los estados de valencia hacia valores negativos de energía, dando como resultado una región de energía prohibida bien definida entre el tope de los estados de valencia ubicado en el punto  $\epsilon = -0.214$  Ry y el mínimo de los estados de conducción ubicado en el punto  $\epsilon = -0.114$  Ry. Este perfil de la densidad de estados para el máximo valor del parámetro de transferencia de carga electrónica ( $\gamma = 1.0$ ) está de acuerdo con los resultados obtenidos en trabajos de investigación con otros tipos de orbitales, tales como: la combinación lineal de orbitales gaussianos (LCGO) de C. S. Wang [18], o la densidad estados obtenida por D. Rasero [1] con el método de Monte Carlo.

#### **7.4 La región de energía prohibida**

Los resultados del cálculo para la región de energía prohibida que se dan en la Tabla N° 6.7 de la página 50, muestran que, para una mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, el sistema presenta un gap bien definido con magnitud de 0.115Ry, que equivale a 1.56eV, evidenciando el carácter semiconductor del sistema.

Para una transferencia del 20% de la carga electrónica que está fuera de las esferas atómicas a las esferas vacías, la región de la energía prohibida es casi nula, lo que implica que las propiedades electrónicas del sistema están orientadas hacia un carácter más conductor.

Para una mayor transferencia de carga electrónica a las esferas vacías, que son del orden 40%, 60% y 80% el ancho de la energía prohibida (el gap) experimenta un ligero incremento, tal como se puede apreciar en la GRAFICA N° 6.15 de la página 50.

Para la máxima transferencia (100%) de la carga electrónica a las esferas vacías en la red cristalina, la región de la energía prohibida queda bien definida con un valor de 0.099 Ry, aproximadamente 1.35 eV, que es comparable al valor experimental de 1.17 eV, y cerca del valor obtenido en otras investigaciones con diferentes métodos.

## 7.5 La energía total


La tabla N° 6.8 en la página 51, muestra los resultados del cálculo de la energía total del estado fundamental del silicio para los diferentes valores del parámetro  $\gamma$  que se muestran. La energía total es de -16.29 Ry para una mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, con una región de energía prohibida (gap) de 0.115 Ry, que equivale a 1.56 eV.

Aunque el sistema presenta su carácter semiconductor para el valor mínimo del parámetro de transferencia de carga ( $\gamma = 0$ ), para una máxima transferencia de carga electrónica ( $\gamma = 1.0$ ) a las esferas vacías de la red cristalina, la energía total

del sistema es  $-16.85 \text{ Ry}$ . Resulta la energía mínima, con una región de energía prohibida de  $0.099 \text{ Ry}$ , equivalente a  $1.35 \text{ eV}$ , de menor valor que para la mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina. Tal como se puede apreciar en la GRAFICA N° 6.16 de la página 51, la máxima transferencia de la carga electrónica ( $\gamma = 1.0$ ) a las esferas vacías de la red cristalina minimiza la energía total, lo que implica una mayor estabilidad del sistema.



## VIII REFERENCIALES

- [17] ANDERSEN Ole Krogh. **Band Structure of Transition Metals.** Physical Review B, Vol. 34: 5253. 1986.
- [22] ANDERSEN Ole Krogh. **The Electronic Structure of Complex System.** New York. Editorial: Phariseau. USA 1983.
- [19] ASHCROFT Neil. and MERMIN N. **Solid State Physics.** New York. Editorial: Holt, Rinehart and Winston. USA 1976.
- [7] CABRERA ARISTA, Cesar. **Uso de la Corrección de Auto-Energía en el Cálculo de la Estructura Electrónica de Sólidos Cristalinos.** Tesis de Licenciatura. Lima. Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas. 1996.
- [20] CARDONA Manuel. **Deformation Potentials of the Direct Gap of Diamond.** Solid State Commun Vol. 58: 421. 1986.
- [21] CAVELL R. G. **X-ray photoemission cross section modulation in diamond, silicon, germanium, methane, silane and germane.** Physical Review B Vol. 7: 5313. 1973.
- [10] GALINDO A., PASCUAL P. **Mecánica Cuántica.** Madrid, España. Editorial: ALHAMBRA S.A. 1ra. Edición. 1978.
- [22] HARRISON W. A. **Electronic Structure and the Properties of Solids.** San Francisco. Editorial: Freeman. USA 1980.
- [9] HOHENBERG P. and KOHN W. Physical Review. Vol. 136: B846. 1964.
- [12] JANAK J. F. Physical Review B, Vol. 18: 7165. USA 1978. 

- [4] KE S. H. and UDA T. **Structural and Electronic Properties of  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  Alloys.**, Physical Review B. Vol. 59, N° 23: 15013. June 1999.
- [13] KOHN Walter, and SHAM Luis. J. Physical Review. Vol. 140: A1133. USA 1965.
- [8] LEVY M. Proc. Natl. Acad. Sci. Vol. 76: 6062. USA 1979.
- [11] LEVY M. Bull. Am. Phys. Soc. Vol. 24: 4. USA 1979.
- [16] MADELUNG O. **In Proceedings of the Ninth International Conference on the Physics of Semiconductors**, Edited S. M. Ryvkin. Vol. 1: 38. Moscow 1968.
- [3] MAJEWSKI Jacek. A. **Advances in the Theory of Electronic Structure of Semiconductors.** Physics State Solids C. Vol. 1, N° 8: 2003. München, Germany 2004.
- [2] MOONTRAGOON P. and HARRISON P. **Band Structure Calculations of Si-Ge-Sn Alloys: Achieving Direct Band Gap Materials.** Semiconductor Science and Technology N° 22: 742 a 748. UK 2007.
- [1] RASERO Diego A. **Tight-Binding Study Using Monte Carlo Method and the Electronic Properties of Si and Ge.** Revista Colombiana de Física Vol. 41, N° 3: 593. Octubre 2009.
- [6] SKRIVER Hans L. **The Linear Muffin-Tin Orbitals (LMTO) Method.** Roskilde, Danish Natural Science Foundation. Denmark 1983.
- [14] SLATER J. C. **The Self-Consistent Field for Molecules and Solids.** New York. Editorial: McGraw-Hill. USA 1974.



- [5] VON DER LINDE W. **Efficient approach to the Ab-initio Hartree-Fock problem of solids with application to diamond and silicon.** Physical Review B Vol. 34: 1063. 1986.
- [15] VON BARTH U. and HEDIN L. Journal Physics C. Vol. 5: 1629. 1972
- [18] WANG C. S. **Self-Consistent Energy Bands, Charge Densities, and Effective Masses.** Physical Review B Vol. 24 N° 6: 3393. Sept. 1981.



## IX APENDICES

### 9.1 Apéndice A

Los parámetros potenciales del método LMTO calculados para la mínima y máxima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, necesarias para determinar las bandas de energía, todos en unidades Ry, se muestran a continuación.

**TABLA N° 9.1**  
**LOS PARAMETROS POTENCIALES,  $\gamma = 0.0$**

	Esferas de Si			Esferas Vacías		
	s	p	d	S	p	d
$E_{\mu}$	-0.6515	0.3039	1.5401	0.3865	1.5460	3.1626
$Q_{\mu}$	0.4127	0.0875	0.0239	0.3987	0.0907	0.0381
$C_{\mu}$	-0.6515	0.3039	1.5401	0.3865	1.5460	3.1626
$\delta_{\mu}$	0.4071	-0.3677	0.3245	0.3958	0.3958	0.3958
P	0.2616	0.2640	0.3173	0.3483	0.2376	0.1812

Fuente: Resultados de la presente investigación

**TABLA N° 9.2**  
**LOS PARAMETROS POTENCIALES,  $\gamma = 1.0$**

	Esferas de Si			Esferas vacías		
	s	p	d	S	p	d
$E_{\mu}$	-0.9924	-0.0488	1.1685	0.1474	1.2786	2.8744
$Q_{\mu}$	0.4098	0.0854	0.0220	0.4041	0.0928	0.0391
$C_{\mu}$	-0.9924	-0.0488	1.1685	0.1474	1.2786	2.8744
$\delta_{\mu}$	0.3863	-0.3491	0.3056	0.4183	0.4095	0.4053
P	0.2853	0.2857	0.3291	0.3102	0.2103	0.1851

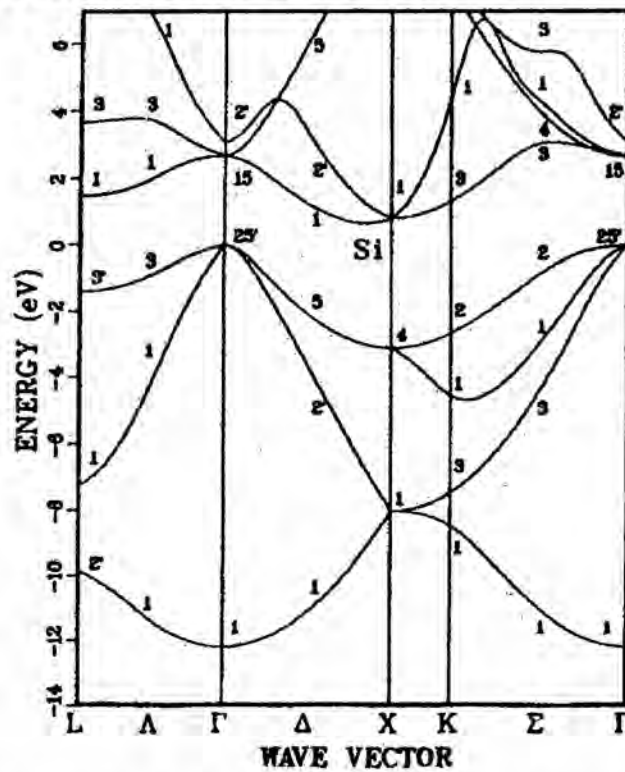
Fuente: Resultados de la presente investigación

## X ANEXOS

### 10.1 Anexo A

La estructura de las bandas de energía del Si, obtenidas por C. S. Wang, calculadas auto-consistentemente con el método de la combinación lineal de los orbitales gaussianos.

**GRAFICA 10.1**  
**ESTRUCTURA DE BANDAS DE ENERGIA Si**



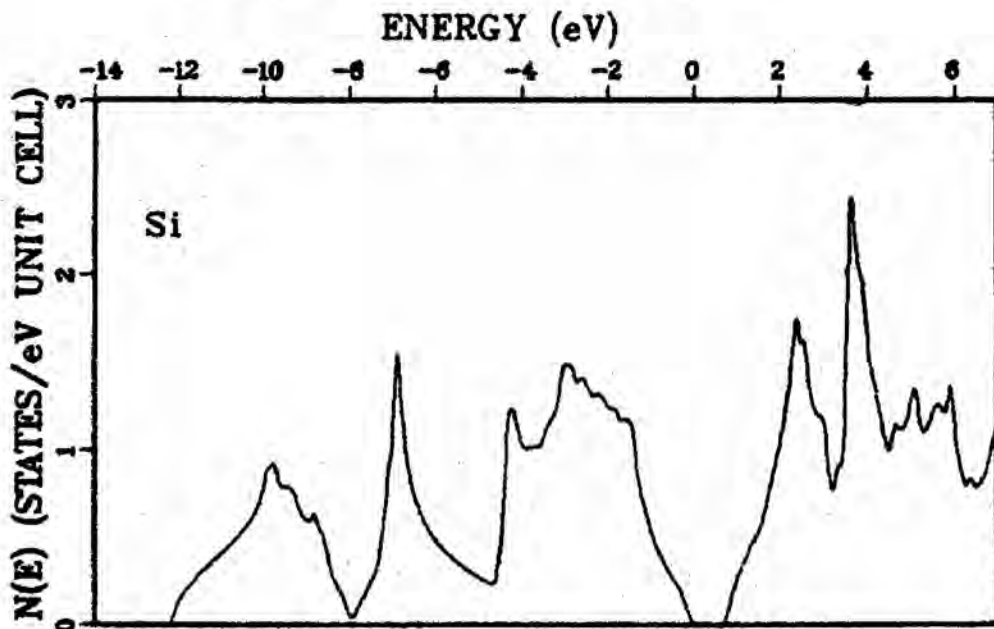
Fuente: Resultados de C. S. Wang [18], usando el método LCGO.



### 10.2 Anexo B.

La densidad de estados del Si, calculadas auto-consistentemente por C. S. Wang, con el método de la combinación lineal de los orbitales gaussianos.

**GRAFICA 10.2**  
**LA DENSIDAD DE ESTADOS - DOS Si**



Fuente: Resultados de C. S. Wang [18], usando el método LCGO.

### 10.3 Anexo C

**TABLA N° 10.1**  
**ENERGÍA PROHIBIDA DEL Si**

TABLE III. Present theoretical and experimental direct ( $E_0$ ) and indirect ( $E_g$ ) for Si, Ge, and GaP band gaps in eV. Source of experimental results is Table 10-1 of Ref. 63.

Si	Theor.	Expt.
$E_0$ ( $\Gamma_{25'}^v - \Gamma_{15}^c$ )	2.66	4.18
$E_g$ ( $\Gamma_{25'}^v - \Delta_1^c$ )	0.65	1.13

Fuente: Resultados obtenidos por W. A. Harrison [22]

TABLA N° 10.2

C. S. WANG AND B. M. KLEIN

TABLE IV. Comparison of present LCGO eigenvalues (eV) with other *ab initio* self-consistent calculations for Si.

	Present work	LAPW <sup>a</sup>	OPW <sup>b</sup> $\alpha = 1$	OPW <sup>b</sup> $\alpha = \frac{2}{3}$	Pseudopotential <sup>c</sup>
$\Gamma_1^p$	-12.20	-12.02	-11.74	-12.04	-12.20
$\Gamma_{25}^p$	0	0	0	0	0
$\Gamma_{15}^c$	2.66	2.49	2.79	2.33	2.48
$\Gamma_2^c$	3.05	3.18	2.75	3.31	2.50
$X_1^p$	-8.03	-7.84	-7.75	-7.83	-8.02
$X_4^p$	-3.11	-2.82	-2.72	-3.00	-2.93
$X_1^c$	0.79	0.55	1.28	0.34	0.52
$X_4^c$	10.11	10.32	9.79	9.87	9.97
$L_2^p$	-9.86	-9.64	-9.53	-9.63	-9.92
$L_1^p$	-7.25	-7.06	-6.75	-7.14	-7.21
$L_3^p$	-1.40	-1.16	-1.18	-1.26	-1.26
$L_1^c$	1.46	1.40	1.60	1.39	1.39
$L_3^c$	3.66	3.37	3.83	3.12	3.12

Fuente: Resultados de C. S. Wang [18], usando el método LCGO.

