

# APROXIMACION DE ENLACE FUERTE EN EL CASO DE ALTOS SOLAPAMIENTOS

D. A. Mirabella y C. M. Aldao

*Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA)  
Universidad Nacional de Mar del Plata y CONICET  
Juan B. Justo 4302, 7600 Mar del Plata.*

R. R. Deza

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,  
Universidad Nacional de Mar del Plata  
Funes 3350, 7600 Mar del Plata.*

Con un modelo analítico simple se calcula el aspecto energético de un electrón en un cristal unidimensional con iteraciones y solapamiento entre vecinos distantes, en la aproximación de enlace fuerte. Se encuentra que el solapamiento afecta la forma funcional de la banda de manera tal que pierde la simetría respecto del nivel atómico corregido en el sentido de aumentar la masa efectiva en el fondo ( $\Gamma$ ) y disminuir la correspondiente al tope (X). Como extensión del modelo evaluamos los errores cometidos al desprestigiar las integrales multicentro involucradas en los elementos de matriz de iteración.

## I. INTRODUCCIÓN

En un trabajo anterior<sup>1-3</sup> estudiamos los efectos de la *no-ortogonalidad entre orbitales vecinos* (NOOV) sobre el espectro energético de un electrón calculado en la *aproximación de enlace fuerte* (AEF) para una cadena infinita de átomos idénticos con interacciones restringidas a primeros vecinos. Mostramos que aún para solapamientos pequeños (pero finitos) la estructura de bandas se vuelve rápidamente *asimétrica* con respecto al nivel atómico corregido, cambiando las masas efectivas del tope del fondo de la banda. Sin embargo, se encuentra que la aproximación de incluir la NOOV es una manera sistemática de tener en cuenta los efectos de la no-ortogonalidad sólo para valores de  $S = \langle n | n+1 \rangle < 0,5$ , ya que el ancho de banda crece y tiende a infinito para  $S=0,5$  y la *masa efectiva* muestra un comportamiento oscilatorio para  $S=0,125$ . Este comportamiento no físico aparece como consecuencia de haber desprestigiado el solapamiento entre vecinos más distantes que el primero.

En este trabajo presentamos una *generalización* del problema en la que los efectos de la no-ortogonalidad entre orbitales se extiende a *todos los vecinos*. Obviamente, sería un desatino considerar solapamientos finitos entre vecinos distantes sin incluir a la vez interacciones de más largo alcance. Así, con la finalidad de efectuar los cálculos analíticamente y evaluar en forma explícita las integrales multicentro involucradas en los elementos de matriz de interacción y desolapamiento, elegimos un conjunto de base formado por *funciones exponen-*

*ciales* (orbitales tipo *s*), en tanto suponemos que el potencial cristalino se puede expresar como la *suma de potenciales atómicos individuales del tipo delta de Dirac*. Como extensión del modelo evaluamos los errores cometidos al tratar de desprestigiar las integrales de tres centros, así como también el efecto de truncar los orbitales.

## II. MODELO

Estudiamos el espectro energético de un electrón en un cristal unidimensional finito de átomos idénticos con interacciones y solapamientos entre vecinos distantes. Para poder calcular analíticamente las integrales multicentro involucrados en los elementos de matriz de interacción y solapamiento entre cualquiera vecinos, asignamos a cada átomo... un orbital tipo *s* de la forma

$$\Phi(x) = (x_0)^{-1/2} \exp(-(|x|/x_0). \quad (1)$$

Suponemos además que el potencial cristalino  $U$  es expresable como suma de los potenciales atómicos individuales que se eligen del tipo delta de Dirac, esto es:

$$U(x) = \sum_n V_n(x) \text{ con } V_n(x) = -A\delta(x-na). \quad (2)$$

El espectro de un electrón calculado en la aproximación de enlace fuerte en presencia de interacciones y solapamientos entre cualesquiera vecinos para una banda tipo *s* es:

$$E(k) = [\alpha - 2 \sum_n \Gamma_n \cos(nka)] / [1 + 2 \sum_n S_n \cos(nka)] \quad (3)$$

Si llamamos  $t = (\alpha_0)^{-1}$ , y tomamos el parámetro de red  $a=1$ , obtenemos las siguientes expresiones para los elementos de matriz (adimensionalizados) del hamiltoniano:

$$S_n = [1 - t(d/dt)]e^{-nt}, \alpha = e^{-t}/Sht, \Gamma_n = (n + \alpha)e^{-nt}$$

Como es de esperar, los sucesivos  $S_n$  decrecen rápidamente para un dado valor del parámetro  $t$ . Si sustituimos estas expresiones en la Ec.(3) y llamamos  $\theta = ka$  obtenemos:

$$\lambda(\theta, t) = e^{-t} \frac{[(cht - \cos\theta)(e^{-t} - 2\cos\theta + cht) + sht(1 - cht \cdot \cos\theta)]}{sht[sht(cht - \cos\theta) - t(1 - cht - \cos\theta)]} \quad (4)$$

donde  $\lambda$  representa la energía adimensionalizada.

Las Figs. 1 y 2 muestran la forma del espectro de la Ec.(4) para dos valores de  $t$ . Los correspondientes valores de  $S_1 = S$  están indicados en la figura. A medida que  $t$  disminuye las integrales  $S_n$  aumentan, y al banda se hace más aguda en el tope ( $X$ ) y más plana en el fondo ( $\Gamma$ ). Estos resultados están de acuerdo con los obtenidos en la aproximación NOOV<sup>1-3</sup>. Es interesante notar sin embargo que ahora las masas efectivas no muestran el comportamiento oscilatorio que en la aproximación NOOV presentaban para  $S > 0,125$ , ni el espectro diverge para  $S = 0,5$ : el ancho de banda crece monótonamente con  $S$  y sólo se hace infinito cuando  $S = 1$  ( $t = 0$ ).]

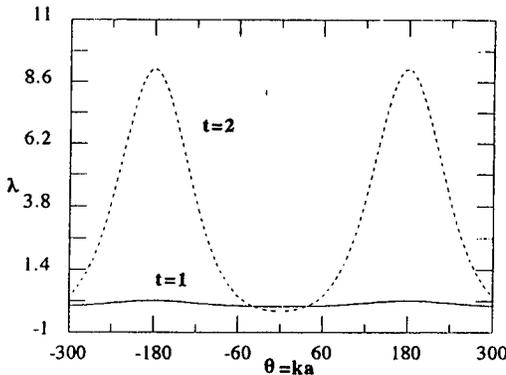


Fig. 1: Forma del espectro para dos valores de solapamiento:  $S = 0,41$  ( $t = 2$ ),  $S = 0,74$  ( $t = 1$ ). Se puede observar claramente cómo la banda se vuelve asimétrica y su ancho aumenta a medida que  $t$  disminuye ( $S$  aumenta).

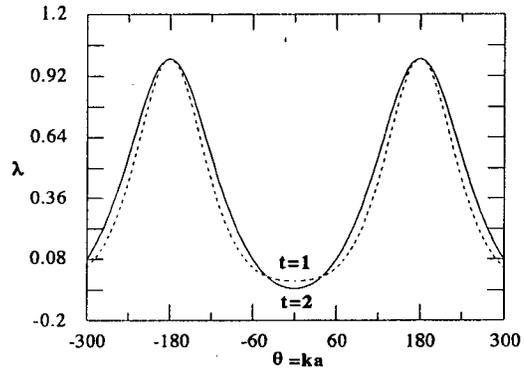


Fig. 2: Estructura de bandas normalizada para distintos valores de solapamiento. Se puede observar claramente cómo a medida que aumenta  $S$  la masa efectiva en ( $\Gamma$ ) aumenta mientras que en ( $X$ ) decrece.

Aprovechamos este modelo analítico para evaluar las diferencias entre el espectro exacto y uno en el que se desprecian las integrales de tres centros involucrados en los elementos de matriz no diagonales del hamiltoniano, que es

$$\lambda(\theta, t) = \frac{(cht - \cos\theta) \cdot (1 - cht - \cos\theta)}{cht[sht(cht - \cos\theta) - t(1 - cht - \cos\theta)]} \quad (5)$$

Como se muestra en el Fig. 3, el efecto de despreciar las integrales de tres centros es generar espectro más ancho, tal que las masas efectivas en el tope son menores que las obtenidas en el modelo exacto.

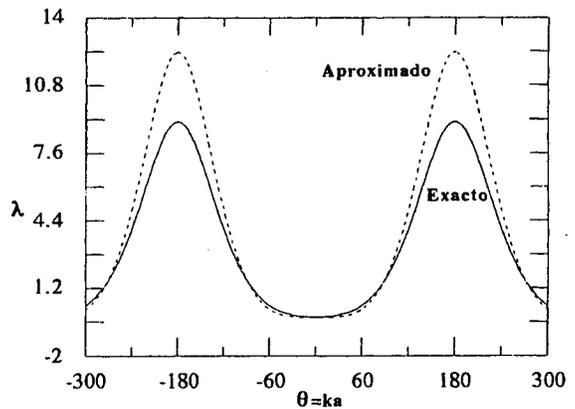


Fig. 3: Comparación del espectro exacto para  $t = 1$  con el que se obtiene al despreciar las integrales de tres centros (Ec. 5). Se observa que el espectro aproximado es más ancho que el exacto.

### III. CONCLUSIONES

1) Cuando se tiene en cuenta explícitamente la no-ortogonalidad entre orbitales cualesquiera, la es-

estructura de bandas se vuelve *asimétrica* en el sentido de disminuir la masa efectiva en el tope y aumentar la del fondo.

2) Se encuentra que las *masas efectivas son extremadamente sensibles al rango* de las interacciones.

3) Se originan *inestabilidades* cuando se restringe el rango de las interacciones.

## RECONOCIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado con el apoyo parcial del CONICET.

## REFERENCIAS

- 1- D. A. Mirabella, C. M. Aldao y R.R. Deza, ANALES AFA **3**, 323-326 (1992).
- 2- D. A. Mirabella, C. M. Aldao y R.R. Deza, *Orbital nonorthogonality in band structure calculations within the tight-binding scheme*, Enviado a American Journal of Physics.
- 3- D. A. Mirabella, C. M. Aldao y R.R. Deza, *Cuán sensible es la estructura de bandas, calculada en la aproximación de enlace fuerte, al solapamiento entre orbitales vecinos?*, Reunión AFA 1992.
- 4- N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, NJ, 1976), pp. 176-184.
- 5- J. Tejeda and N.J. Shevchick, Phys. Rev. **B13**, 2548-2552 (1976).
- 6- S. M. Sze, *Physics of Semiconductors Devices* (John Wiley & Sons, New York, 1981), Chap. 1.
- 7- G. F. Koster and J. C. Slater, Phys. Rev. **95**, 1167-1174 (1954).
- 8- W. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids* (W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1980), pp. 536-538.
- 9- P. W. Anderson, Phys. Rev. **181**, 25 (1969).
- 10- J. E. Simmons, C. C. Lin, D. F. Fouquet, E. E. Laflon and R. C. Chaney, J. Phys. **C8**, 1549 (1975).