

# UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN



## INFORME FINAL DE INVESTIGACIÓN

“ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LA ALEACIÓN  
ALUMINIO-ANTIMONIO  $AlSb$  CALCULADA CON EL  
MÉTODO LMTO”

AUTOR: Mg. CÉSAR CABRERA ARISTA

Periodo de ejecución: 01 de abril de 2022 al 31 de marzo de 2023

Resolución de aprobación Nro. 346-2022-R

LINEA DE INVESTIGACION: FÍSICA DE LA MATERIA

Callao, 2023

PERU

A handwritten signature in blue ink, located in the bottom right corner of the page.



INFORMACION BASICA

FACULTAD:

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN:

UNIDAD DE INVESTIGACION DE ING. QUÍMICA

TITULO:

ESTRUCTURA ELECTRONICA DE ALEACIÓN ALUMINIO-ANTIMONIO AISb  
CALCULADA CON EL METODO LMTO.

AUTOR:

Mg. CESAR CABRERA ARISTA

CODIGO ORCID:

0000-0003-2612-6560

DNI:

09650209

LUGAR DE EJECUCION:

LAB. DE QUÍMICA FIQ-UNAC

UNIDAD DE ANALISIS:

ESTRUCTURA ELECTRONICA DE ALEACIÓN AISb CON FASE ZINCBLLENDE

TIPO:

INVESTIGACIÓN BÁSICA Y TEÓRICA.

TEMA OCDE:

FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA 1.03.02

## DEDICATORIA

Dedicado a mi apreciado hijo Pedro David, a quien Dios bendiga e ilumine su camino.

A small, handwritten signature in blue ink, located in the bottom right corner of the page. The signature is stylized and appears to be a single name or set of initials.

## AGRADECIMIENTO

Se agradece a la UI-FIQ por la oportunidad que me brinda de realizar este proyecto de investigación.

A handwritten signature in blue ink, consisting of a stylized initial 'A' followed by a horizontal line and a vertical stroke.

## ÍNDICE

	Página
ÍNDICE	1
TABLAS DE CONENIDO	4
Índices de Figuras	4
Índices de Tablas	5
RESUMEN	6
ABSTRAC	7
INTRODUCCIÓN	8
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	10
1.1 Descripción de la realidad problemática	10
1.2 Formulación del problema.	11
1.2.1 Problema general	12
1.2.2 Problemas específicos	12
1.3 Objetivos:	13
1.3.1 Objetivo general	13
1.3.2 Objetivos específicos	13
1.4 Limitantes de la investigación	13
1.4.1 Teórico	13
1.4.2 Temporal	14
1.4.3 Espacial	14
II. MARCO TEÓRICO	15
2.1 Antecedentes	15
2.1.1 Antecedente internacional	15
2.1.2 Antecedente nacional	16
2.2 Bases teóricas	18
2.2.1 Formalismo teórico del funcional de la densidad	18
2.2.2 El potencial efectivo en la red cristalina	21
2.2.3 La densidad de carga electrónica en la red cristalina	25



	Páginas
2.2.4 La energía total de sistema	28
2.2.5 El método LMTO	29
2.3 Marco conceptual	34
2.3.1 Estructura electrónica calculada con ondas planas	34
2.4 Definición de términos básicos	37
III. HIPÓTESIS Y VARIABLES	39
3.1 Hipótesis	39
Hipótesis general	39
Hipótesis específica	39
3.1.1 Operacionalización de variables	39
3.1.2 Definición operacional de variables	39
IV. DISEÑO METODOLOGICO	41
4.1 Tipo y diseño de la investigación.	41
4.1.1 Tipo	41
4.1.2 Diseño	41
4.2 Método de investigación	42
4.3 Población y muestra.	42
4.4 Lugar de estudio y período de desarrollo	42
4.5 Técnicas e instrumentos para recolección de información	42
4.6 Análisis y procesamiento de datos.	42
V. RESULTADOS	43
5.1 Resultados descriptivos	43
5.1.1 El potencial efectivo de la red cristalina	43
5.1.2 Los parámetros potenciales LMTO	45
5.1.3 Las bandas de energía del AlSb	46
5.1.4 La densidad de estados del AlSb	53
5.1.5 La brecha prohibida de energía	56
5.1.6 La energía total de la aleación de AlSb	57
5.2 Resultados inferenciales	58



	Páginas
5.3 Otro tipo de resultados según naturaleza de la hipótesis	58
VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS	59
6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	59
6.2 Contrastación de resultados con otros estudios similares	61
6.3 Responsabilidad ética	61
CONCLUSIONES	62
RECOMENDACIONES	63
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	64
ANEXOS	68
Unidades y equivalencias usadas	68
Siglas usadas	68
Matriz de consistencia	69

## TABLAS DE CONTENIDO

	Página
Índice de Figuras	
Figura 1: Estructura blenda de cinc de aleación AlSb	23
Figura 2: Densidad de carga electrónica de valencia en Al	25
Figura 3: Densidad de carga electrónica de valencia en Sb	26
Figura 4: Carga electrónica de la coraza de Antimonio Sb	27
Figura 5: Potencial efectivo del átomo de antimonio en la red AlSb	43
Figura 6: Potencial efectivo del átomo de aluminio en la red AlSb	44
Figura 7: Potencial efectivo de esferas vacías en la red del AlSb	44
Figura 8: Bandas de energía del AlSb, $\gamma = 0.0$	50
Figura 9: Bandas de energía del AlSb, $\gamma = 0.2$	50
Figura 10: Bandas de energía del AlSb, $\gamma = 0.4$	51
Figura 11: Bandas de energía del AlSb, $\gamma = 0.6$	51
Figura 12: Bandas de energía del AlSb, $\gamma = 0.8$	52
Figura 13: Bandas de energía del AlSb, $\gamma = 1.0$	52
Figura 14: Densidad de estados del AlSb calculada con $\gamma = 0.0$	54
Figura 15: Densidad de estados del AlSb calculada con $\gamma = 0.2$	54
Figura 16: Densidad de estados del AlSb calculada con $\gamma = 0.4$	55
Figura 17: Densidad de estados del AlSb calculada con $\gamma = 0.8$	55
Figura 18: Densidad de estados del AlSb calculada con $\gamma = 1.0$	56
Figura 19: Energía prohibida en aleación de AlSb	57
Figura 20: Energía total en aleación cristalina AlSb.	58

## Índice de Tablas

Tabla 1: Operacionalización de variables	40
Tabla 2: Parámetros potenciales LMTO de esferas atómica en la red AlSb	45
Tabla 3: Parámetros potenciales de esferas vacías en la red de AlSb	46
Tabla 4: Valores de las bandas de energía en la dirección $\Gamma$ - L.	47
Tabla 5: Valores de las bandas de energía en la dirección $\Gamma$ - X.	48
Tabla 6: Valores de las bandas de energía en la dirección $\Gamma$ - K.	49
Tabla 7: La densidad de estados en aleación de AlSb.	53
Tabla 8: Brecha de energía prohibida en aleación AlSb	56
Tabla 9: Energía total en aleación cristalina de AlSb	57

## RESUMEN

En este trabajo se presenta el cálculo de la estructura electrónica y de la energía total de la aleación antimonio de aluminio AlSb con una red cristalina tipo blanda de cinc llena de esferas atómicas de tamaño diferente que preservan la densidad del material y la simetría en la red. Se efectuaron los cálculos de las bandas de energía y de la densidad de estados (DOS), para lo cual se resolvió la ecuación de Schrödinger de la red cristalina de AlSb con el método de los orbitales lineales muffins tin (LMTO) (Skriver, 1984). Se usó un potencial efectivo local formulado con base en la teoría del funcional de la densidad (DFT), formalismo que nos permitió usar la formulación de Ceperley-Alder (Ceperley & Alder, 1980) para la aproximación LDA de los términos de intercambio y de correlación del potencial efectivo. Una vez obtenido los autovalores de energía de la estructura de bandas y, con la distribución de la carga electrónica de la red cristalina ya calculada previamente, se calculó la energía total de la red cristalina.

Las bandas de energía del AlSb calculada para  $\gamma = 0.0$  evidencia una brecha directa de energía prohibida entre el tope de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción en el punto  $\Gamma-\Gamma$  de 0.118 Ry, equivalente a 1.605 eV. En las direcciones de alta simetría  $\Gamma-X$  y  $\Gamma-L$  se obtuvo una brecha de 0.158 Ry y 0.155 Ry, que equivalen a 2.149 eV y 2.109 eV. La brecha de energía prohibida obtenida aquí es cercana al valor experimental de 1.696 eV para el AlSb reportado en la literatura (Vurgaftman, Meyer, & Ram-Mohan, 2001). La energía total de la red cristalina resultó con valor mínimo de -16.67 Ry caso que corresponde a toda la pequeña fracción de la carga electrónica externa de los átomos residiendo en las esferas vacías de la diagonal de la red cristalina.

Palabras claves: Densidad de estados, bandas de energía, semiconductores



## ABSTRACT

This paper presents the calculation of the electronic structure and total energy of the aluminum antimonide alloy AlSb with a zinc blende crystal lattice filled with atomic spheres of different sizes that preserve the density of the material and the symmetry in the lattice. Energy bands and state density (DOS) calculations were performed, solving the Schrödinger equation of the AlSb crystal lattice using the muffins tin linear orbital method (LMTO) (Skriver, 1984a). A local effective potential formulated based on density functional theory (DFT) was used, a formalism that allowed us to use the Ceperley-Alder formulation (Ceperley & Alder, 1980) for the LDA approximation of the terms of trade and correlation of the effective potential. Once the energy eigenvalues of the band structure were obtained and, with the distribution of the electronic charge of the crystal lattice already calculated previously, the total energy of the crystal lattice was calculated.

The energy bands of the AlSb calculated for  $\gamma = 0.0$  evidence a direct gap of prohibited energy between the top of the valence band and the minimum of the conduction band at the point G-G of 0.118 Ry, equivalent to 1.605 eV. In the high symmetry directions  $\Gamma$ -X and  $\Gamma$ -L a gap of 0.158 Ry and 0.155 Ry was obtained, which are equivalent to 2.149 eV and 2.109 eV. The forbidden energy b collected here is close to the experimental value of 1.696 eV for AlSb reported in literature (Vurgaftman, Meyer, & Ram-Mohan, 2001). The total energy of the crystal lattice resulted with a minimum value of -16.67 Ry case that corresponds to the entire small fraction of the external electronic charge of the atoms residing in the empty spheres of the diagonal of the crystal lattice.

Keywords: State density, energy bands, semiconductors



## INTRODUCCIÓN

En esta investigación se realizó el cálculo de la estructura electrónica del estado fundamental de la aleación de antimonio de aluminio, AlSb. Este estudio teórico usa el método LMTO de O. K. Andersen (Andersen et al., 2007) para resolver la ecuación de Schrödinger del electrón en la red cristalina de la aleación semiconductora de AlSb. La brecha de energía prohibida se determinó indirectamente de la estructura de las bandas de energía y de la densidad de estados (DOS).

La estructura de las bandas de energía fue calculada en las direcciones  $\Gamma$ -L,  $\Gamma$ -X,  $\Gamma$ -K de alta simetría de la red cristalina, los cálculos se efectuaron para diferentes valores de la pequeña fracción de la carga electrónica valencia (externa al átomo) residiendo en las esferas vacías de la diagonal de la red cristalina, fracción que se describe por medio del parámetro adimensional  $\gamma$  que varía entre 0.0 y 1.0. Se obtuvieron las bandas de energía al resolver la ecuación de Schrödinger del electrón en la red cristalina del AlSb.

El método de los orbitales lineales muffins tin, LMTO, permitió resolver la ecuación de Schrödinger usando un potencial efectivo de interacción electrónica local usado en 2020 por Cabrera para calcular la estructura electrónica del AlAs (Cabrera, 2020). Este potencial fue formulado con la teoría del funcional de la densidad (Kohn, 1999), para el potencial de intercambio y correlación se usó la aproximación que usa la densidad local de spin polarizado descrita por MacLaren (MacLaren et al., 1991).

La densidad de estados (DOS) de esta aleación de AlSb también fue calculada para cada valor del parámetro  $\gamma$  que fueron empleados en el cálculo de la estructura de bandas de energía. Los resultados de la DOS obtenidos en esta investigación confirmaron el valor de la brecha de energía prohibida que se



obtuvo en los cálculos de las bandas de energía y resulto próxima al valor experimental reportada en la literatura de especialidad.

La energía total de esta aleación cristalina de AlSb se calculó con los autovalores de energía obtenidos de resolver la ecuación de Schrödinger junto con la densidad de carga electrónica usada para calcular el potencial de la red cristalina. Energía total que también fue calculada para diferentes valores del parámetro  $\gamma$ , que representa aquella una pequeña fracción de la carga electrónica, externa a las esferas atómicas, llenando las esferas vacías de la diagonal en la red cristalina. Lo que nos ha permitido establecer el valor mínimo de la energía total dentro de los valores de energía total obtenidos para los pequeños cambios de la densidad de carga electrónica en la red cristalina de esta aleación de AlSb.



## I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

### 1.1 Descripción de la realidad problemática

Partiendo de la propuesta en el proyecto de investigación inicial, el compuesto de Aluminio-Antimonio (AlSb) es una aleación semiconductora que pertenece al grupo III-V de la tabla periódica, material con una alta movilidad de electrones y una brecha de energía prohibida directa no estrecha. Siendo de gran potencial para diversas aplicaciones y de nuevas tecnologías, que bien podrían reemplazar a los semiconductores usados en dispositivos electrónicos y equipos optoelectrónicos, tales como los diodos emisores de luz, foto-detectores y láseres. Avances en campos de nanotecnología motivo el estudio de alineación de bandas de energía en semiconductores y aislantes con funcionales dieléctricos dependientes (Hinuma et al., 2017), con propósito de evaluación de alto rendimiento.

En 2013 Wang, efectuó el estudio de la estructura electrónica del AlSb y de otros semiconductores III-V de estructura cristalina tipo blenda de cinc con primeros principios (Wang et al., 2013b), que usa el marco de la teoría del funcional de la densidad con un potencial de intercambio y correlación semi local propuesto recientemente (Tran & Blaha, 2009). La estructura de las bandas fue calculada con el método del proyector de ondas aumentadas con un conjunto de base de ondas planas de 400 eV implementado en el *Vienna Ab initio Simulation Package* (VASP).

En 2016 Mendoza y Estrada, efectuaron el estudio de las propiedades estructurales, elásticas, electrónicas y térmicas de aleaciones semiconductoras (Mendoza-Estrada et al., 2017), se calcularon las propiedades electrónicas de algunos semiconductores del grupo III-V usando el método del pseudo potencial en el marco de la teoría del funcional de la densidad LDA (Kohn et al., 1996) y una aproximación del gradiente generalizado con el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof (Perdew et al., 1996).



Recientemente en 2021, Vu presento cálculos de primeros principios para predecir redes bidimensionales de BSb, AlSb, MgSi<sub>2</sub> usando el formalismo de la DFT implementado en el programa *Viena Ab initio simulation package* (VASP) y usando un conjunto mínimo de base de ondas planas con energía cinética de 600eV para representar los orbitales de Kohn-Sham, una aproximación de Perdew-Burke-Ernzerhof al funcional de energía de intercambio y correlación (Vu et al., 2021).

En 1999 Remediakis publicó el cálculo de las propiedades electrónicas de materiales semiconductores del grupo III-V, empleando la corrección de estados excitados propuesta por Fritsche y el método de las ondas gaussianas. En la que se reporta las propiedades electrónicas de un conjunto de aleaciones semiconductoras entre ellas el AlSb, calculada en el marco de la teoría generalizada del funcional de la densidad el estudio (Remediakis & Kaxiras, 1999)

La estructura electrónica de materiales y aleaciones pueden ser calculadas con el método de los orbitales lineales Muffin-Tin (Andersen et al., 2007), LMTO por sus siglas en ingles. En nuestro país este método LMTO se implementó a partir de 1988 y comienzos de la década de los 90s por el profesor alemán Dr. H. J. Nowak (Nowak, 1991). Método que fue usado en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos para el estudio de las propiedades electrónicas de materiales sólidos.

## **1.2 Formulación del problema.**

De lo ya expuesto en el proyecto inicial, en el Perú no contamos con laboratorios y los equipos necesarios para efectuar un estudio experimental de la estructura electrónica de los materiales, sin embargo, es posible realizar un estudio teórico de las propiedades electrónicas de la aleación Aluminio-Antimonio (AlSb), que nos permita conocer la estructura electrónica, la energía total y así estimar otros efectos indirectos tal como la estabilidad del sistema cristalino y las posibles



transiciones de fase de la aleación de AlSb.

Desarrollar un estudio teórico que use una técnica práctica como del método de los orbitales lineales muffin-tin o método LMTO (Andersen et al., 2007) que nos permita calcular la estructura electrónica, como las bandas de energía, el perfil de la densidad de estados, la brecha de la energía prohibida y la energía total de una aleación como la de AlSb en su fase cristalina blenda de cinc.

Por otro lado, existe un alto riesgo de manipular la muestra material y el gran costo económico de los equipos o de las técnicas experimentales que requieren de las condiciones especiales y controladas generan resulta ser un problema al determinar la estructura electrónica de los materiales y aleaciones. Ante este problema surge la pregunta:

### **1.2.1 Problema general**

¿Será posible conocer la estructura electrónica de la fase cristalina blenda de cinc de la aleación Aluminio-Antimonio AlSb usando el método LMTO?

### **1.2.2 Problemas específicos**

1.- ¿Se pueden determinar las bandas de energía y la densidad de estados DOS del estado fundamental de una aleación de AlSb con fase cristalina blenda de zinc usando el método LMTO?

2.- ¿Se puede calcular la energía total de una aleación de AlSb con fase cristalina blenda de zinc usando el método LMTO?

Como una alternativa de solución a las dos preguntas, se propone la presente investigación que toma el marco de la teoría del funcional de la densidad DFT (Kohn, 1999) y el método de los orbitales lineales muffin-tin (LMTO) (Skriver, 1984) para resolver la ecuación de Schrödinger y con esta calcular la estructura electrónica del AlSb. Método que requiere de un potencial local inicial formulado



con la DFT (Perdew & Kurth, 2003) y con una aproximación LDA para el término de intercambio y correlación usado por Cabrera (Cabrera, 2018) se resuelve la ecuación de Schrödinger para conocer la estructura electrónica.

### **1.3 Objetivos**

Los objetivos que se persiguen son las de conocer las propiedades electrónicas del estado fundamental de los materiales y aleaciones con fase cristalina tipo blenda de cinc.

#### **1.3.1 Objetivo general**

Conocer la estructura electrónica del estado fundamental de una aleación de Aluminio-Antimonio (AlSb) con una fase cristalina de red tipo blenda de cinc (*zinc-blende*), resolviendo la ecuación de Schrödinger de un electrón en el sólido cristalino con el método LMTO.

#### **1.3.2 Objetivos Específicos**

- a) Calcular la estructura de las bandas de energía y la densidad de estados de la aleación Aluminio-Antimonio AlSb con fase cristalina blenda de *zinc*.
- b) Calcular la energía total del estado fundamental de la aleación de AlSb con fase cristalina blenda de *zinc*.

### **1.4 Delimitantes de la investigación**

#### **1.4.1 Teórico**

Esta investigación es básica-teórica; no tiene limitantes, existen diversos métodos y técnicas para el cálculo de la estructura electrónica de la materia condensada. La investigación fue motivada por el interés de conocer la estructura electrónica de esta aleación de AlSb y de nuevos compuestos con un alto potencial de aplicaciones tecnológicas. La investigación teórica de las propiedades electrónicas de una aleación o nuevo material es importante porque reduce el peligro y el alto



costo de la manipulación de sustancias que podrían ser tóxicas, además los resultados se pueden usar para determinar otras propiedades físicas.

#### **1.4.2 Temporal**

La limitación temporal en el caso de la presente investigación es la del periodo establecido entre el 01 de abril de 2022 al 31 de marzo de 2023.

#### **1.4.3 Espacial**

La pandemia del Covid-19, limita el espacio geográfico a mi hogar en el distrito de San Miguel, Lima, Perú. Aunque a nivel de información por la internet no es un problema la limitante espacial.



## II. MARCO TEÓRICO

### 2.1 Antecedentes

Como antecedentes se cuentan con estudios de las propiedades electrónicas de materiales semiconductores, en los que se plantean diversos métodos de solución de la ecuación de Schrödinger del sistema cristalino, tanto nacional como internacional.

#### 2.1.1 Antecedentes internacionales

Como antecedente internacional se cuenta con muchos estudios teóricos de la aleación de AlSb reportados que anteceden a este proyecto, se pueden tomar en cuenta los siguientes trabajos de investigación:

Un recientemente estudio de Vu en 2021, reporto los cálculos de primeros principios para predecir propiedades electrónicas de redes bidimensionales de BSb, AlSb, MgSi<sub>2</sub> usando el formalismo de la DFT implementado en el programa *Viena Ab initio simulation package* (VASP) y usando un conjunto mínimo de base de ondas planas con energía cinética de 600eV para representar los orbitales de Kohn-Sham, una aproximación de Perdew-Burke-Ernzerhof al funcional de energía de intercambio y correlación (Vu et al., 2021).

Un estudio de Wang en 2013, reporta un estudio teórico de la estructura electrónica de semiconductores III-V de estructura cristalina tipo blenda de cinc calculadas con primeros principios (Wang et al., 2013a), que usa el formalismo de la teoría del funcional de la densidad para el potencial de interacción, con un término de intercambio semi local reciente propuesto por Tran en 2009 (Tran & Blaha, 2009).

En un artículo de 2005, Jivani (Jivani et al., 2005) reporta un estudio de la energía total, la ecuación de estados y el módulo de bulk y de los parámetros de estructura



de bandas de energía de los compuestos semiconductores de AlP, AlAs y AlSb calculados con teoría de perturbación de orden superior. Se usó un potencial que combina tipos de interacciones lineales y cuadráticos.

En un artículo publicado en 2001, Vurgaftman reporta los parámetros de la estructura de bandas de energía para diversos compuestos semiconductores y aislantes del grupo III-V de la tabla periódica (Vurgaftman et al., 2001). En este se discute la aproximación multibandas  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  con teoría de perturbación de primer y segundo orden, se efectuó el cálculo de las propiedades electrónicas de un conjunto de aleaciones semiconductoras del grupo III-V como la del antimonio de aluminio entre otras aleaciones. Este modelo es comparado con otros, como el modelo del pseudo potencial, el modelo semi empírico *tight-binding*, el modelo del orbital de enlace efectivo.

Como ya fue mencionado en 1999, Remediakis presentó los parámetros de la estructura de bandas de energía del compuesto de AlSb y de otros compuestos semiconductores obtenidos con la teoría del funcional de la densidad generalizada (Remediakis & Kaxiras, 1999) que uso un potencial de intercambio y correlación propuesto por Fritsche (Fritsche, 1991), con enfoque DFT/LDA auto consistente y computacionalmente eficiente, sin embargo, sus resultados de la brecha de energía prohibida difieren en 36.6% del valor experimental reportado.

### **2.1.2 Antecedente nacional**

En nuestro país no existe investigaciones sobre la estructura electrónica de la aleación de antimonio de aluminio (AlSb), pero existen estudios de las propiedades electrónicas y de la energía prohibida de otros compuestos semiconductores usando el método de los orbitales lineales LMTO que pueden ser un punto de partida para estudiar la energía prohibida del AlSb, tales como:



En un estudio publicado en 2020, C. Cabrera reporta la estructura electrónica de la aleación semiconductor de arseniuro de aluminio AlAs, obtenidas con el método LMTO (Cabrera, 2020). Método que emplea un potencial local LDA con un potencial de intercambio y correlación en la aproximación de Barth-Edin para resolver la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino, lo que permite obtener la estructura de las bandas de energía, la densidad de estados con buenos resultados en la brecha de energía prohibida comparadas con los valores experimentales.

En otro artículo de 2018, C. Cabrera reporta un estudio de la energía prohibida en la estructura electrónica del compuesto semiconductor de fósforo de aluminio AlP (Cabrera, 2018), usando el método LMTO para calcular la estructura electrónica y la energía total. Los resultados muestran una brecha de energía prohibida directa de 2.56eV en la estructura de las bandas de energía y se corrobora en los resultados de la densidad de estados ocupados, resultado que se desvía en 1.56% del valor experimental reportado en la literatura.

En el artículo presentado en 2017, C. Cabrera publica el cálculo de la estructura electrónica de los compuestos de GaP y SiC (Cabrera, 2017) en la que reporta una brecha de energía prohibida indirecta de 2.32eV para el compuesto de fósforo de galio GaP y una brecha prohibida directa de 2.22eV para el compuesto carburo de silicio SiC. La estructura electrónica fue calculada con un potencial local parametrizado, que depende de la simetría de las esferas atómicas y vacías ubicadas en la red cristalina del sólido.

A inicios de la década de los 90s en la facultad de ciencias físicas de la UNMSM y bajo la dirección del profesor alemán Dr. H. Nowak se hicieron los primeros cálculos de la estructura electrónica de materiales sólidos usando el método LMTO en el Perú. Para los primeros cálculos de estructura electrónica se usaron el modelo del pseudo potencial (Nowak, 1991) y los potenciales DFT/LDA.



## 2.2 Bases teóricas

### 2.2.1 Formalismo teórico del funcional de la densidad

En un artículo publicado en 1999 Kohn establece que la teoría formal de la estructura electrónica de la materia se fundamenta en la ecuación de Schrödinger no relativista para un sistema de muchos electrones que se describe con la función de onda  $\psi$  (Kohn, 1999), ecuación que toma en cuenta tanto la interacción de los electrones en  $\vec{r}_j$  con los iones en  $\vec{R}_l$ , como la interacción electrón-electrón y que se escribe de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \nabla_j^2 \psi + \left\{ - \sum_{j,l} \frac{Z_l e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_l|} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|} \right\} \psi = E \psi \quad (2.1)$$

En la que  $\hbar$  es la constante de Planck dividida entre la constante  $2\pi$ ; la cantidad  $m$  denota la masa fundamental del electrón, la cantidad  $e^2 = (e^+)^2 / (4\pi\epsilon_0)$  es el cuadrado de la carga eléctrica del electrón multiplicada por la constante de Coulomb; aquí los  $\mathbf{r}_j$  denotan los vectores de posición del j-ésimo electrón; los otros  $\mathbf{R}_l$ ,  $Z_l$  son los vectores de posición y el número atómico de los núcleos;  $E$  denota la energía del sistema y  $\psi$  es la función de onda electrónica para un sistema de N electrones que depende de 3N coordenadas espaciales y N coordenadas de spin.

En un artículo publicado en 1965, Kohn y Sham idearon un método práctico para calcular la densidad de carga electrónica  $\rho$  y la energía  $E$  del estado fundamental de un sistema de muchos electrones (Kohn, 1965). Método que, ciertamente sería capaz de dar resultados exactos, pero resulta que en las ecuaciones de este formalismo se tiene un funcional no conocido, que con frecuencia se suele tratar con alguna aproximación, de modo que la formulación de Kohn-Sham de esta teoría del funcional de la densidad DFT dará resultados aproximados.



En el método de Kohn-Sham, el valor esperado de la ecuación (2.1) de Schrödinger que, expresado en unidades atómicas de energía, denotado como un funcional  $F[\rho]$  de la densidad de la carga electrónica, se reescribe como la suma de otros tres funcionales de la forma,

$$F[\rho] = T[\rho] + U[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (2.2)$$

El funcional  $T[\rho]$ , a la derecha de la ecuación (2.2) representa la energía cinética de un sistema de electrones sin interacción, funcional que será definida más adelante; el otro funcional  $U[\rho]$ , el segundo a la derecha en la ecuación (2.2) describe la clásica energía potencial de interacción de Coulomb entre los electrones y que se escribe de la forma

$$U[\rho] = \frac{1}{2} \int d^3r \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (2.3)$$

El funcional  $E_{xc}[\rho]$ , último a la derecha en la ecuación (2.2), un término cuyo funcional desconocido describe la energía potencial de intercambio y correlación para este sistema de electrones. Una muy buena aproximación para esta energía potencial es el funcional de intercambio y correlación de un gas homogéneo de electrones de spin polarizado discutido por McLaren, (McLaren, 1993). La densidad de carga electrónica depende de los orbitales orto-normales  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  de número cuántico  $\alpha$ , de acuerdo a la relación:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 \quad (2.4)$$

Definidos los orbitales  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ , el funcional  $T[\rho]$  de la energía cinética en la ecuación (2.2), se reescribe de una forma más conveniente:

$$T[\rho] = \sum_{\alpha} \left\langle \psi_{\alpha} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \psi_{\alpha} \right\rangle \quad (2.5)$$

Lo que nos permite expresar convenientemente el valor esperado de la ecuación (2.1), llamada la Hamiltoniana del sistema, de la forma:

$$\begin{aligned} \tilde{E} = \sum_{\alpha} \left\langle \psi_{\alpha} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \psi_{\alpha} \right\rangle + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' d^3r + \int \rho(\vec{r})\epsilon_{xc}(\vec{r})d^3r \\ + \int \rho(\vec{r})v(\vec{r})d^3r \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ahora la minimización de esta ecuación (2.6) expresión funcional de la energía total, permitiría conocer la energía total del estado fundamental para un sistema de muchos electrones. Determinar la energía del estado fundamental ahora se resume a la minimización de la ecuación (2.6) con respecto a las funciones de onda  $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$  con la única restricción de estar sujetos a la condición de la normalización de los orbitales  $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ , lo que nos lleva a resolver la ecuación de Euler – Lagrange conocida como el problema del valor extremo:

$$\frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}(\mathbf{r})} \left( \tilde{E} - \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \int |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 d^3r \right) = 0 \quad (2.7)$$

La cantidad  $\epsilon_{\alpha}$  dentro de la sumatoria son los conocidos multiplicadores de Lagrange, que en buena cuenta viene a ser los autovalores de energía que deseamos conocer. Tomando el valor extremo de la ecuación (2.7), esta nos conduce directamente a la ecuación auto consistente de Kohn-Sham para un solo electrón que se mueve en un campo de potencial efectivo, que escrita en unidades atómicas es:

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ef}(\mathbf{r}) \right] \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (2.8)$$

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden para un solo electrón que interacciona con el potencial efectivo  $V_{ef}(\vec{r})$  de los demás electrones y de los iones que conforman la red cristalina del sistema (Kohn et al., 1996).

Este potencial efectivo expresado en unidades atómicas, es un campo escalar que depende de la densidad de carga electrónica de la red cristalina. Es un potencial local, que en principio contiene toda la información acerca de la estructura de la red cristalina de la aleación y, es de la forma siguiente:

$$V_{ef}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + \int \frac{\rho(\mathbf{r}')d^3r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + v_{xc}(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

En esta ecuación (2.9), la expresión  $v(\vec{r})$  a la derecha de la de la igualdad, es un potencial externo que nos describe la contribución de los otros núcleos atómicos de la red cristalina. El término central es la clásica contribución del potencial de interacción de Coulomb y, la última expresión es el termino cuántico que describe el potencial de intercambio y correlación del electrón(Parr, 1989), es:

$$v_{xc}(\vec{r}) = \varepsilon_{xc}(\vec{r}) + \rho(\vec{r}) \frac{\partial \varepsilon_{xc}(\vec{r})}{\partial \rho} \quad (2.10)$$

Los cálculos de estructura electrónica usando la teoría del funcional de la densidad (DFT), ciertamente podrían ser exactos, siempre que la expresión funcional de la energía de intercambio y de correlación se conociera. Pero en casi todos los cálculos de estructura electrónica con la teoría del funcional de la densidad se suele usar la aproximación de la densidad local (LDA) para el termino de intercambio y correlación.

### 2.2.2 El potencial efectivo en la red cristalina

Para obtener la estructura electrónica una aleación resolviendo la ecuación (2.8) es conveniente asumir que todo el volumen de la red cristalina está lleno esferas atómicas, ASA (Andersen & Jepsen, 1994). Esto reduce la formulación del potencial y también simplifica el cálculo computacional, porque permite que este potencial efectivo se formule únicamente con una dependencia radial. Puesto que, si se toma un promedio sobre todo el ángulo sólido de la esfera atómica en este



potencial efectivo, este se puede escribir de la forma

$$V_{ef}(r) = 2 \int_0^{S_R} \frac{4\pi r^2 \rho(r)}{r} dr + V_{xc}[\rho(r)] + v_{ion}(r) \quad (2.11)$$

Ahora el electrón se mueve en un campo de potencial efectivo que es solo función de la coordenada radial  $r$ . Sin esta aproximación sería muy complicado de resolver la ecuación auto-consistente de Kohn-Sham de un electrón que interacciona con el potencial efectivo de la red cristalina del sólido. Con esta dependencia solo radial del potencial efectivo, la ecuación (2.8), de Kohn-Sham, ahora es tratable con la técnica de la separación de variables, así definiendo un orbital como el producto de tres funciones mutuamente independientes de la forma  $\psi = R(r) \cdot \Theta \cdot \Phi$  y con una redefinición  $P_l(r) = r \cdot R_l(r)$ , la parte radial de la ecuación (2.8) ahora se reescribe como:

$$\frac{\partial^2 P_l(r)}{\partial r^2} + \left[ \epsilon_l + \frac{l(l+1)}{r^2} - V_{ef}(r) \right] P_l(r) = 0 \quad (2.12)$$

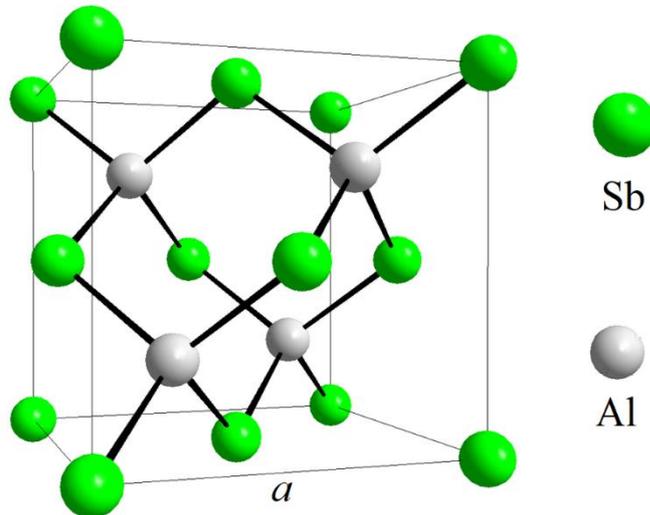
Esta es una ecuación diferencial de segundo orden, que ya podemos resolver con diferentes técnicas computacionales, como la técnica de diferencias finitas entre otras. Aquí las soluciones  $P_l(r)$  de esta ecuación (2.12), que podemos llamar las ondas parciales, dependen del número cuántico principal  $l$ , y con  $l = \alpha$  se representa la clase de orbital en las soluciones de (2.12). La parte angular de la ecuación diferencial que resulta de la separación de variables de la ecuación (2.8), no tratamos explícitamente aquí, ya que sus soluciones los armónicos esféricos se encuentran tabulados en la literatura de especialidad (Jackson, 2021).

En su estado fundamental la aleación semiconductor de AlSb adquiere una fase sólida con red cristalina tipo blenda de cinc, en inglés *zincblende*, con un parámetro o constante de red cubica  $a = 6.1355 \text{ \AA}$ , (Vurgaftman, Meyer, & Ram-Mohan, 2001). La red tipo blenda de cinc es una estructura cristalina abierta que presenta regiones a lo largo de las diagonales de la red sin la ocupación atómica

correspondiente, esta red cristalina se puede considerar como dos redes de Bravais interpenetradas y desplazadas a lo largo de la diagonal de la red cúbica, por un cuarto de longitud de la constante de la red cristalina. Se puede considerar como dos redes cristalinas de caras centradas, red FCC, superpuestas entre sí, con puntos de base en  $(0,0,0)a$  y  $(1,1,1)a/4$ , similar a la red cristalina de diamante, pero con dos tipos diferentes de átomos. Esta podemos apreciar en la Figura 1 a continuación.

**Figura 1**

*Estructura blenda de cinc de aleación AlSb,*



*Fuente: NANOPDF.com*

Las regiones de la diagonal sin ocupación atómica de esta red son llenadas con esferas vacías del tamaño de las otras esferas atómicas de la red cristalina, pero preservando la simetría y sobre todo la densidad de la aleación material. Por otro lado, una pequeña parte de la carga electrónica de valencia externa al radio atómico regresa a sus esferas atómicas y el resto llena de manera uniforme las esferas vacías en la diagonal de la red cristalina. La fracción de esta carga electrónica externa se transfiere mediante un parámetro sin unidades, denotado por  $\gamma$ , el mismo que varía entre 0 y 1.

A causa de la fracción pequeña de la carga electrónica de valencia, residiendo en las esferas vacías de la red, se debe considerar la interacción entre las esferas vacías de la red cristalina que se llenaron con parte de esta fracción de la carga electrónica y cuya contribución se debe de considerar en el potencial efectivo de la red (Cabrera, 2020). Así que para el átomo que está centrado en la posición  $\mathbf{R}$ , el potencial efectivo  $V_{\mathbf{R}}(r)$ , inicialmente descrito por la ecuación (2.11) ahora con la inclusión de la interacción de las esferas vacías con una pequeña fracción de la carga electrónica es de la forma:

$$V_{R_i}(r) = -\frac{2Z_{R_i}}{r} + \frac{1}{r} \int_0^r 2\sigma_{R_i}(r') dr' + \int_r^{S_R} \frac{2\sigma_{R_i}(r')}{r'} dr' + v_{xc}[\rho_{R_i}(r)] - \sum_{\vec{R}'} 2q_{\vec{R}'} \sum_{\vec{T}} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}' - \vec{T}|} \quad (2.13)$$

La última cantidad a la derecha de (2.13), constituye la pequeña contribución de las otras esferas vacías de la red cristalina al potencial efectivo, cuando se llenan con la pequeña fracción de la carga electrónica de valencia residente fuera de las esferas atómicas, la que se describe por:

$$V_{M_i} = -\sum_{\vec{R}'} 2q_{\vec{R}'} \sum_{\vec{T}}' \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}' - \vec{T}|} \quad (2.14)$$

El apóstrofe ' en la sumatoria significa que en la doble sumatoria se excluye el término  $\vec{R} = \vec{R}' + \vec{T}$ . Siendo  $\vec{R}$  el vector de posición de la esfera vacía en el centro de la diagonal de la red cubica,  $\vec{R}'$  la posición de la segunda esfera vacía a lo largo de la diagonal de la red cubica y  $\vec{T}$  el vector de posición de las otras esferas vacías de la red cristalina. Para determinar su contribución al potencial efectivo primero es necesario calcular el valor de la fracción pequeña carga externa a su propia esfera atómica de la red.

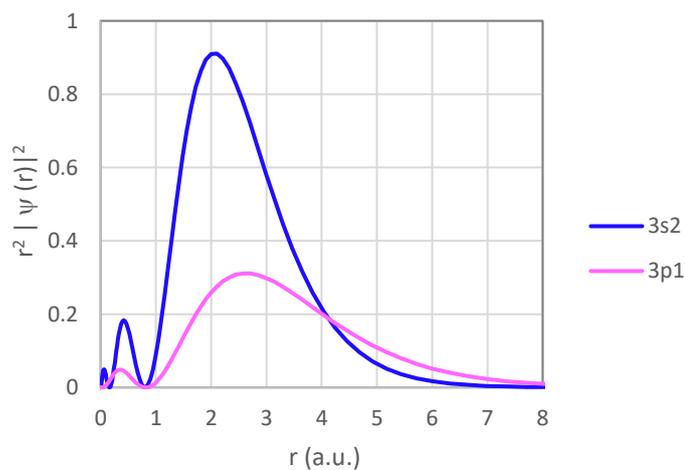
### 2.2.3 La densidad de carga electrónica en la red cristalina

Para calcular el potencial efectivo de la red cristalina, descrita por la ecuación (2.13), se requiere de la carga electrónica total por átomo  $\rho_{\mathbf{R}}(\vec{r})$  de cada átomo de la red cristalina. En la que el subíndice  $\mathbf{R}$  define aquel átomo situado en las posiciones  $\mathbf{R}_1$  o  $\mathbf{R}_2$  de la red cristalina, aquí usamos una densidad de carga electrónica que podemos escribir como la suma de la carga electrónica de la coraza  $\rho_c(\vec{r})$  y la carga electrónica de valencia  $\rho_v(\vec{r})$  (Cabrera Arista, 2019):

$$\rho_{\mathbf{R}}(\vec{r}) = \rho_c(\vec{r}) + \rho_v(\vec{r}) \quad (2.15)$$

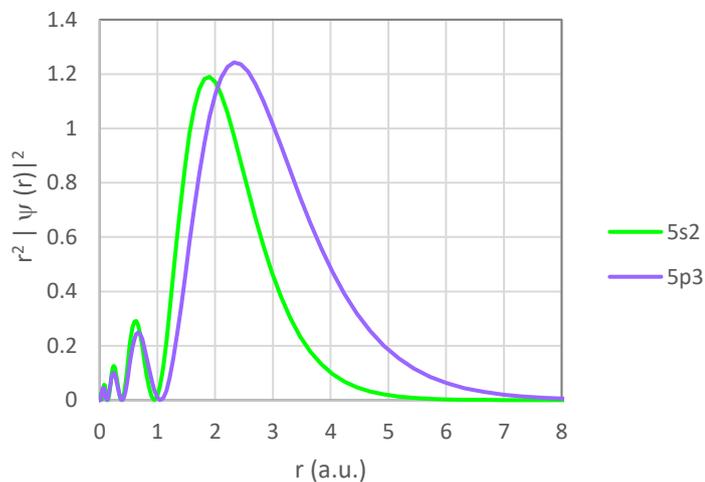
Siendo aquí  $\rho_c(\vec{r})$  idéntica a la densidad de carga electrónica de la coraza del átomo libre, mientras que la densidad de carga electrónica de valencia  $\rho_v(\vec{r})$  de las esferas atómicas de la red cristalina, es en la práctica diferente a la del átomo libre. Gracias al programa escrito en fortran ATOM.FOR de J. P. Desclaux (Desclaux 1981), disponible en internet como software libre, con este programa modificado por el profesor H. J. Nowak se calcula la densidad de carga electrónica del átomo libre.

**Figura 2**  
*Densidad de Carga electrónica de valencia en Al.*



La Figura 2 muestra la típica densidad de carga de valencia del átomo libre de Aluminio, la Figura 3 muestra la densidad de carga de valencia para la del átomo libre de Antimonio. En ambos casos una fracción  $q_R$  de esta carga electrónica contribuye más allá de las 3.0 *au* de distancia y es la fracción de la carga que será transferida a su propia esfera atómica y a las esferas atómicas vacías que residen en las diagonales de la red cristalina, (Cabrera, 2018).

**Figura 3**  
*Densidad de carga electrónica de valencia en Sb*



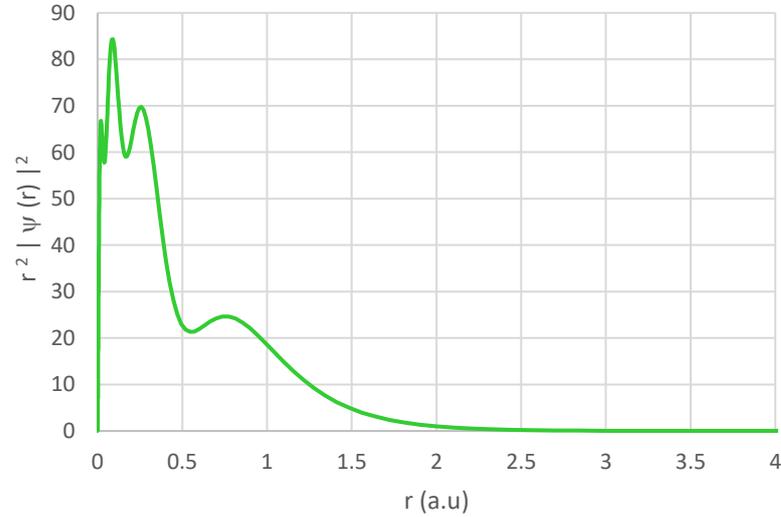
Por otro lado, la Figura 4 presenta la densidad de carga electrónica de la coraza para el átomo libre de antimonio, de esta se observa muy poca contribución de la carga electrónica de la coraza a la red cristalina más allá del radio de sus esferas atómicas de modo que esta retorna a su propia esfera atómica. Como los electrones de la coraza se consideran fuertemente ligados al núcleo dentro de sus propias esferas atómicas, en general podemos asumir, que, para cualquiera de los átomos de la red cristalina, esta densidad de carga electrónica de la coraza no difiere de modo significativo con respecto a la densidad de la carga electrónica de la coraza  $\rho_{c,libre}(\vec{r})$  de la del átomo libre.

La parte muy difícil de tratar es la densidad de la carga electrónica de valencia

$\rho_v(\vec{r})$  de la red cristalina, puesto que la carga electrónica de valencia de las esferas atómicas de la red cristalina es muy diferente de la carga electrónica de valencia del átomo libre. Sin embargo, la densidad de carga electrónica de valencia de la red cristalina será conocida resolviendo la parte radial de la ecuación (2,12) de Kohn-Sham.

**Figura 4**

*Carga Electrónica de la Coraza en átomo libre de Sb.*



El potencial efectivo usado para resolver la ecuación (2.12) fue calculado con una densidad de carga electrónica de la red cristalina, que también depende de la pequeña fracción  $q_{R,v}$  de la carga electrónica de valencia externa residiendo homogénea y uniformemente en sus esferas atómicas propias situadas en  $\vec{R}_1, \vec{R}_2$  y en las esferas vacías  $\vec{R}_3, \vec{R}_4$  de la diagonal de la red, mediante el parámetro  $\gamma$  y de acuerdo a la regla:

$$\begin{aligned}
 \rho_{R_1,a}(\vec{r}) &= \rho_{R_1c,libre}(\vec{r}) + \rho_{R_1v}(\vec{r}) + \gamma \frac{3q_{R_1}}{4\pi(s_{R_1})^3} \\
 \rho_{R_2,a}(\vec{r}) &= \rho_{R_2c,libre}(\vec{r}) + \rho_{R_2v}(\vec{r}) + \gamma \frac{3q_{R_2}}{4\pi(s_{R_2})^3} \\
 \rho_{R_3}(\vec{r}) &= \rho_{R_4}(\vec{r}) = (1 - \gamma) \frac{3 \cdot \frac{1}{2}(q_{R_1} + q_{R_2})}{4\pi(s_{R_1})^3}
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

### 2.2.4 La energía total del sistema

Hohenberg y Kohn en 1964, idearon un método eficaz para calcular la energía total de un sistema de muchos electrones usando la aproximación de la densidad local LDA, (Hohenber & Kohn, 1964). Esta energía descrita por la ecuación (2.6) requiere de los autovalores de energía y de la densidad de carga electrónica de la red cristalina, cantidades que se determinaran resolviendo la ecuación (2.12) con el potencial efectivo descrito en la ecuación (2.13). Ahora ya se conocen tanto los orbitales  $\psi_a(\mathbf{r})$  como los autovalores de energía, así que la densidad de carga electrónica de la red cristalina también ya se conoce.

El termino complicado en la energía cinética de los electrones requerida en la ecuación de la energía total, este se puede tratar con el artificio siguiente: la ecuación (2.8) se multiplica por la izquierda con el orbital  $\psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r})$  y luego se suma sobre todos los orbitales ocupados, esto nos permite despejar la energía cinética de los electrones en términos de los autovalores de energía y de la integral que contiene al potencial efectivo que apantalla al electrón y que ya fue calculado previamente, de modo que se tiene:

$$\sum_{\alpha,\sigma} \langle \psi_{\alpha\sigma} | -\frac{1}{2}\nabla^2 | \psi_{\alpha\sigma} \rangle = \sum_{\alpha,\sigma} \epsilon_{\alpha\sigma} - \sum_{\alpha,\sigma} \int d^3\vec{r} \psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) V_{ef}(\vec{r}) \psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) \quad (2.17)$$

En esta ecuación el último término a la derecha, la integral que contiene al potencial efectivo es la contribución de los términos que se escriben de la forma:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\sigma} \int d^3\vec{r} \psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) V_{ef}(\vec{r}) \psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) &= \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \\ &+ \int d^3\vec{r} \rho(\vec{r}) v_{xc}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r} \rho(\vec{r}) v(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.18)$$

La combinación de estas ecuaciones (2.17) y (2.18) con la ecuación (2.6), permite tener una expresión general para calcular la energía total del estado fundamental de un sistema de electrones en términos de los autovalores de energía ya obtenidos al calcular las bandas de energía, en términos de la clásica energía

potencial de Coulomb y de la energía de intercambio y correlación en la aproximación LDA (Kohn, 1999), que es de la forma:

$$E = \sum_{\alpha,\sigma} \varepsilon_{\alpha\sigma} - \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{xc}[\rho] - \int d^3\vec{r} \rho(\vec{r})v_{xc}(\vec{r}) \quad (2.19)$$

Esta última ecuación es la expresión más general para el cálculo de la energía total de un sistema de electrones en la aproximación LDA,(Hohenberg & Kohn, 1964).

### 2.2.5 El método LMTO

Según el enfoque de Z. Wang, el método de los orbitales Muffin-Tin (MTO) se adapta muy bien al problema de calcular la estructura electrónica de una aleación sólida cristalina, (Wang Z. , 2009). Este método aprovecha eficazmente la naturaleza de que el potencial de la red cristalina es de simetría esférica en la región de posición de las esferas atómicas y que es aproximadamente de forma plana en la región intersticial, de modo que el potencial Muffin-Tin  $V_{MT}$ , expresado en unidades Rydberg, se define

$$V_{MT}(\vec{r}) = \begin{cases} V(\vec{r}), & r \leq s_{\bar{R}} \\ V_o, & r > s_{\bar{R}} \end{cases} \quad (2.20)$$

Siendo  $s_{\bar{R}}$  es el radio de las esferas atómicas muffin-tin. La aproximación de las esferas atómicas ASA(Skriver, 1984), permite elegir el radio  $s_{\bar{R}}$  de manera que el volumen de todas las esferas atómicas dentro de la red cubica sea de igual valor al volumen de la red cristalina misma, con una ligera superposición de las esferas atómicas. Para este modelo de potencial la ecuación de Schrödinger en la región de las esferas atómicas y en la intersticial son:

$$[-\nabla^2 + V(\vec{r}) - E] \psi(\vec{r}) = 0; \quad r \in A \quad (2.21a)$$

$$-\nabla^2 \psi(\vec{r}) = 0; \quad r \in I \quad (2.21b)$$



Como lo describe Wang (Wang, Zi (Faculteit der Natuurwetenschappen, 2009), en la región intersticial las funciones de onda satisfacen la ecuación de Laplace y las soluciones se escriben de la forma

$$\psi(\vec{r}) = u_l(\vec{r})Y_L(\hat{r}) \quad (2.22)$$

Con  $\hat{r} = \vec{r}/r$  y siendo el subíndice L los números cuánticos  $l, m$ ; la cantidad  $Y_L(\hat{r})$  representando a los armónicos esféricos (Jackson, 2021) y la función  $u_l(\vec{r})$  una amplitud radial, solución de la parte radial de la ecuación de Laplace

$$-\frac{\partial^2 u_l(r)}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial u_l(r)}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) = 0 \quad (2.23)$$

Ecuación diferencial con dos tipos de soluciones, la solución ordinaria (funciones de Bessel) y la solución no ordinaria (funciones de Hankel). Ambas soluciones de la ecuación radial de Laplace (2.23) tienen la forma:

$$J_L(r) = J_l(r)Y_L(\hat{r}), \quad J_l(r) = \frac{1}{2(2l+1)} \left(\frac{r}{\omega}\right)^l, \quad (2.24a)$$

$$K_L(r) = K_l(r)Y_L(\hat{r}), \quad K_l(r) = \left(\frac{r}{\omega}\right)^{-l-1}, \quad (2.24b)$$

La cantidad  $\omega$  en ambas soluciones es para que estas soluciones sean funciones adimensionales. Estos armónicos esféricos aquí, son funciones reales y satisfacen la condición de orto-normalidad:

$$\int Y_L(\hat{r})Y_{L'}(\hat{r})d^2\hat{r} = \delta_{LL'} \quad (2.25)$$

Por otro lado, las soluciones con centro en la posición de las diferentes esferas atómicas de la red, es decir las soluciones  $J_L(\vec{r}_{\vec{R}})$  y  $K_L(\vec{r}_{\vec{R}})$  se relacionan unas con las otras, puesto que la solución no ordinaria  $K_L(\vec{r}_{\vec{R}})$  con centro en la posición  $\vec{R}$  de la red se puede expandir en términos de la solución ordinaria  $J_{L'}(\vec{r}_{\vec{R}'})$  con centro en otra posición  $\vec{R}' \neq \vec{R}$  de la red cristalina, mediante la expresión



$$K_L(r_{\vec{R}}) = - \sum_{L'} S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'} J_{L'}(r_{\vec{R}'}) \quad (2.26)$$

Ahora aquí la cantidad  $S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'}$  son las constantes de estructura canónica, son además simétricas ( $S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'} = S_{\vec{R}'L', \vec{R}L}$ ) y funciones de la inversa de la distancia  $|\vec{R} - \vec{R}'|$ . Para el potencial con simetría esférica centrado en la posición  $\vec{R}$ , la ecuación (2.21a) dentro de la esfera ( $r < s_{\vec{R}}$ ) es:

$$[-\nabla^2 + V_{\vec{R}}(r) - E] \phi_{\vec{R}L}(\vec{r}, E) = 0 \quad (2.27)$$

Cuyas funciones solución  $\phi_{\vec{R}L}(\vec{r}, E)$  para un valor de energía E, se reescribe como el producto de dos funciones:

$$\phi_{\vec{R}L}(\vec{r}, E) = \phi_{\vec{R}l}(r, E) Y_L(\hat{r}) \quad (2.28)$$

Siendo la parte  $\phi_{\vec{R}l}(r, E)$  una función que satisface la parte radial de la ecuación de Schrödinger dentro de las esferas atómicas de la red cristalina, que es de la forma:

$$\left[ -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_{\vec{R}}(r) - E \right] \phi_{\vec{R}l}(r, E) = 0 \quad (2.29)$$

Las dos funciones de onda que son solución dentro de las esferas atómicas y solución en la región intersticial, se deben combinar a fin de obtener una solución completa en la ASA (Andersen et al., 2007), con la condición de que la función orbital resultante y su derivada primera deben ser continuas en el borde de la esfera ( $r = s_{\vec{R}}$ ). Con estas condiciones de contorno preestablecidas, la función regular que es solución de (2.29) dentro de la esfera es de la forma  $\phi_{\vec{R}l}(r, E) \propto r^l$  para  $r \rightarrow 0$ . La solución no ordinaria de la ecuación de Laplace,  $K_L(\vec{r})$ , función que decae fuera de la esfera, puesto que se requiere que  $\phi_{\vec{R}l}(r, E) \rightarrow 0$  para  $r \rightarrow \infty$ , permite plantear una función de onda muffin-tin orbital, MTO por sus siglas en inglés, de la forma siguiente:



$$\phi_L(\vec{r}, \varepsilon) = i^l Y_L(\hat{r}) \begin{cases} u_l(r, \varepsilon), & r \leq s_{\bar{R}} \\ \left[ \frac{D_l + l + 1}{2l + 1} \left( \frac{r}{s_{\bar{R}}} \right)^l + \frac{l - D_l}{2l + 1} \left( \frac{r}{s_{\bar{R}}} \right)^{-l-1} \right] u_l(s_{\bar{R}}, \varepsilon), & r > s_{\bar{R}} \end{cases} \quad (2.30)$$

Función en la que  $L$  representa ambos números cuánticos  $l$  y  $m$ , la cantidad  $u_l(r, \varepsilon)$  es la solución de la ecuación radial de Schrödinger,  $Y_L(\hat{r})$  son los armónicos esféricos descritos en la literatura y la expresión:

$$D_l(r, \varepsilon) = \frac{s_{\bar{R}}}{u_l(s_{\bar{R}}, \varepsilon)} \left. \frac{\partial u_l(r, \varepsilon)}{\partial r} \right|_{r=s_{\bar{R}}} \quad (2.31)$$

Es la derivada logarítmica de la solución  $u_l(r, \varepsilon)$  y evaluada al borde de la esfera atómica  $r = s_{\bar{R}}$ . Como la ecuación (2.30) es una función que no podemos normalizar porque el factor  $\left( r/s_{\bar{R}} \right)^l$  es un término que diverge fuera de la esfera atómica, se plantea una solución de la ecuación de Schrödinger que se puede normalizar, siendo de la forma:

$$\phi_L(\vec{r}, \varepsilon) = i^l Y_L(\hat{r}) \begin{cases} \left( \frac{2l + 1}{l - D_l} \frac{u_l(r, \varepsilon)}{u_l(s_{\bar{R}}, \varepsilon)} - \frac{P_l(\varepsilon)}{2(2l + 1)} \left( \frac{r}{s_{\bar{R}}} \right)^l \right), & r \leq s_{\bar{R}} \\ \left( \frac{r}{s_{\bar{R}}} \right)^{-l-1}, & r > s_{\bar{R}} \end{cases} \quad (2.32)$$

En esta ecuación las funciones  $P_l(\varepsilon)$  son conocidas como los parámetros potenciales, definidos como:

$$P_l(\varepsilon) = 2(2l + 1) \frac{D_l(\varepsilon) + l + 1}{D_l(\varepsilon) - l} \quad (2.33)$$

Como en la red cristalina habrá un átomo centrado en cada esfera atómica (Andersen & Jepsen, 1994), dentro de cada esfera atómica la función de onda total es la suma de la función de onda propia de la esfera atómica y de las colas de las funciones de onda de las otras esferas atómicas.

Las soluciones de la ecuación radial dentro de una esfera  $u_l(r, E)$ , es una combinación lineal de MTO centradas en diferentes átomos y expresadas por la expansión

$$\psi(r, E) = \sum_{\vec{R}L} \phi_L(r_{\vec{R}}, E) C_{\vec{R}L} \quad (2.34)$$

La que será una solución de la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino, siempre que todos los términos  $(r/s_{\vec{R}})^l$  se cancelen en la posición central de la esfera atómica. La expansión de las colas en las posiciones  $\vec{R}' \neq 0$ , con respecto a la posición central, mediante la expresión

$$i^l Y_L(\hat{r}_{\vec{R}}) \left(\frac{r_{\vec{R}}}{s_{\vec{R}}}\right)^{-l-1} = - \sum_{L'} \left(\frac{r_{\vec{R}'}}{s_{\vec{R}}}\right)^{L'} \frac{1}{2(2L'+1)} i^{L'} Y_{L'}(\hat{r}_{\vec{R}'}) S_{\vec{R}'L', \vec{R}L} \quad (2.35)$$

En la que  $\vec{r}_{\vec{R}} = \vec{r} - \vec{R}$ , la distancia  $r_{\vec{R}} = |\vec{r} - \vec{R}|$  y con los términos  $S_{\vec{R}'L', \vec{R}L}$  como las constantes de estructura, la condición de cancelación de las colas de las funciones onda se puede escribir como:

$$\sum_{\vec{R}'L'} [P_{\vec{R}L}(E) \delta_{\vec{R}\vec{R}'} \delta_{LL'} - S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'}] C_{\vec{R}'L'} = 0 \quad (2.36)$$

Como las constantes de estructura  $S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'}$  ya tienen los datos acerca de la red cristalina y la función potencial  $P_{\vec{R}L}(E)$  contiene la información de los potenciales atómicos, esta ecuación resulta útil para el cálculo de las bandas de energía  $\epsilon(\vec{k})$  en el espacio recíproco, siempre que  $\vec{R}'$  sea sumada sobre las posiciones atómicas de la red cristalina y que la función de onda sea una función de Bloch.

### 2.3 Marco Conceptual

La estructura electrónica de un material o compuesto es una técnica que nos permite caracterizar la naturaleza conductora, semiconductor o aislante de cualquier aleación cristalina. La estructura electrónica se puede conocer al resolver la ecuación de Schrödinger del electrón en la red cristalina. Pero lo cual se usa un potencial efectivo que depende de la densidad de carga electrónica de la red cristalina y es formulado mediante la teoría del funcional de la densidad (Perdew, 2003), teoría que usa la aproximación de la densidad local LDA (Kohn, 1965) para el potencial de intercambio y correlación.

En 2020 Cabrera (Cabrera, 2020), concluye que el método de los orbitales lineales muffin-tin ó LMTO por sus siglas en inglés, se adapta convenientemente para resolver la ecuación de Schrödinger de un electrón que interacciona con el potencial efectivo de la red cristalina, lo que nos lleva a conocer los auto valores de energía en el espacio recíproco para las direcciones de alta simetría del momento cristalino  $\mathbf{k}$  y de estos obtener la estructura electrónica de la aleación material.

#### 2.3.1 Estructura electrónica calculada con ondas planas

Siguiendo el enfoque de F. Domínguez (Domínguez, 2001), para el cálculo de la estructura electrónica en sólidos cristalinos requiere la solución de la ecuación de Schrödinger de cada electrón individual, que expresado en unidades de energía atómica Rydberg (1Ry), en la que  $\hbar = 2m = 1$ , resulta de la forma:

$$[-\nabla^2 + V(\vec{r})]\psi_n(\vec{r}, \vec{k}) = E_n(\vec{k})\psi_n(\vec{r}, \vec{k}) \quad (2.37)$$

Donde  $\vec{k}$  es el momento cristalino del electrón y n el índice de la banda de energía. El potencial cristalino  $V(\vec{r})$  incluye tanto la interacción con la red como con los restantes electrones del cristal y posee, por tanto, las mismas propiedades de simetría de la red cristalina del sólido. Muchas de las técnicas para calcular la estructura electrónica de los sólidos, se basan en el desarrollo de la función de

onda electrónica  $\psi_n(\vec{r}, \vec{k})$  en términos de una base apropiada, por lo que el problema se reduce a encontrar los coeficientes del desarrollo de expansión. Una vez conocidas las funciones de onda ya se puede calcular la relación de dispersión electrónica  $E(\vec{k})$ , que constituye la estructura de bandas de energía de la red cristalina.

Dado que la función de onda debe satisfacer el teorema de Bloch, es conveniente utilizar funciones base que también lo satisfagan. Las funciones más sencillas que cumplen este requisito son ondas planas de la forma  $e^{i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}}$ , siendo  $\vec{k}_q$  un vector de la red recíproca. La demostración de que efectivamente estas funciones verifican el teorema de Bloch es sencilla y los detalles se pueden hallar en la literatura de especialidad, (Melendez Martinez, 2012). El desarrollo de la función de onda será entonces de la forma:

$$\psi_n(\vec{r}, \vec{k}) = (N\Omega)^{-\frac{1}{2}} \sum_q b_n(\vec{k} - \vec{k}_q) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}} \quad (2.38)$$

Donde los coeficientes  $b_n$  son desconocidos. Aquí N es el número de celdas unidad del cristal y  $\Omega$  es el volumen de cada una de ellas, de modo que  $N\Omega$  es el volumen de todo el sólido. Ahora multiplicando (2.38) por la expresión:

$$(N\Omega)^{-\frac{1}{2}} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}} \quad (2.39)$$

Luego integramos a todo el volumen del cristal se obtiene la siguiente ecuación para los coeficientes  $b_n(\vec{k} - \vec{k}_q)$  del desarrollo:

$$\sum_q \left\{ [(\vec{k} - \vec{k}_q)^2 - E_n(\vec{k})] \delta_{q,q'} + V(\vec{k}_{q'} - \vec{k}_q) \right\} b_n(\vec{k} - \vec{k}_q) = 0 \quad (2.40)$$

En la que  $V(\vec{k}_{q'} - \vec{k}_q)$  es la transformada de Fourier del potencial cristalino en cada celda unidad, es decir que se escribe de la forma:

$$V(\vec{k}_{q'} - \vec{k}_q) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) \quad (2.41)$$

Para conocer las soluciones no nulas, se impone que el determinante de la ecuación (2.40) se anule, de forma que la relación de dispersión puede calcularse a partir de la condición

$$\det \left[ \left[ (\vec{k} - \vec{k}_q)^2 - E_n(\vec{k}) \right] \delta_{q,q'} + V(\vec{k}_{q'} - \vec{k}_q) \right] = 0 \quad (2.42)$$

Este determinante es del orden del número de elementos de la base utilizada, por tanto, es conveniente usar una base de elementos finito, de modo que el determinante también será finito. Como el potencial cristalino cumple la simetría  $V(-\vec{k}) = V(\vec{k})$  la matriz resultante es Hermítica y, por tanto, los auto valores de energía  $E_n(\vec{k})$  son reales. Como aplicación consideramos el estudio de Harrison (Harrison, 1960) para aluminio con red cubica de cara centrada, FCC, siendo  $a$  el parámetro de la red cristalina los vectores unitarios de la red reciproca

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1); \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1); \quad \vec{C} = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1) \quad (2.43)$$

En el espacio reciproco forman una red cubica centrada en cuerpo, con ocho vectores de menor módulo de la forma  $\frac{2\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ , de modo que la zona de Brillouin queda determinada por ocho planos perpendiculares a dichos vectores en sus puntos medios, dando lugar a un octaedro truncado. La relación de dispersión a lo largo de las principales direcciones de simetría, se pueden obtener con bastante precisión utilizando un desarrollo de expansión de tan solo cuatro ondas planas de la forma  $e^{i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}}$  en las direcciones:

$$\vec{k}_1 = \frac{2\pi}{a}(0,0,0); \quad \vec{k}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,0,2); \quad \vec{k}_3 = \frac{2\pi}{a}(1,1,1); \quad \vec{k}_4 = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1) \quad (2.44)$$



En cuanto a la transformada de Fourier del potencial, solo hay dos coeficientes no nulos:

$$V(\vec{k}) = V_1 = 0.0295 Ry; \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{a}(1,1,1)$$

$$V(\vec{k}) = V_2 = 0.0550 Ry; \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{a}(0,0,2)$$

Siendo los demás coeficientes  $V(\vec{k})$  iguales para los mismos valores de  $|\vec{k}|$ . Por razones de practicidad se define una masa efectiva  $m^* = 2\pi/a$  en la matriz del Hamiltoniano, que para el caso particular del aluminio su valor es 1.32, de modo que el determinante (2.42) para este caso práctico resulta como:

$$\begin{vmatrix} \frac{(\vec{k}-\vec{k}_1)^2}{m^*} - E & V_2 & V_1 & V_1 \\ V_2 & \frac{(\vec{k}-\vec{k}_1)^2}{m^*} - E & V_1 & V_1 \\ V_1 & V_1 & \frac{(\vec{k}-\vec{k}_3)^2}{m^*} - E & V_2 \\ V_1 & V_1 & V_2 & \frac{(\vec{k}-\vec{k}_1)^2}{m^*} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.45)$$

Su diagonalización permite conocer la estructura de las bandas de energía en las direcciones cristalográficas de alta simetría de la red cristalina.

## 2.4 Definición de términos básicos

**Orbital:** también llamada la función de onda de un electrón, es la densidad de probabilidad asociada a un electrón con un valor  $\epsilon_j$  de energía.

**Potencial efectivo:** Es un campo escalar asociado a la energía potencial con el que un electrón interacciona en la red cristalina, y en el sistema atómico su unidad de medida es un electrón-voltio entre un Coulomb (1 eV/C), en el sistema internacional su unidad es conocida como un voltio (1V).



Hamiltoniano: Es un operador cuántico definido como la suma del operador cuántico de energía cinética y del operador cuántico de energía potencial, en el sistema de unidades atómicas se mide en eV y en el SI su unidad de medida es un Joule (1J).

Bandas de energía: son los autovalores de energía obtenidos cuando la ecuación de Schrödinger de la red cristalina se resuelve en el espacio recíproco y en las direcciones de alta simetría de la red. En el sistema de unidades atómicas su magnitud se mide en eV, aunque por razones prácticas aquí usaremos la unidad de energía Rydberg ( $1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ eV}$ ).

Momento cristalino: o vector de onda  $\vec{k}$ , es una cantidad vectorial del espacio recíproco, que denota las direcciones cristalográficas de alta simetría de la red cristalina. Mide la frecuencia espacial con la que se repite las posiciones espaciales atómicas en la red cristalina, en el sistema atómico de unidades se mide en radian entre un radio de Bohr ( $1.0 \text{ rad}/a.u.$ ).



### III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

#### 3.1 Hipótesis

**Hipótesis General:** Es posible conocer las propiedades electrónicas del estado fundamental de una aleación cristalina tipo blenda de cinc de Aluminio-Antimonio (AlSb), resolviendo con el método de los orbitales lineales muffin-tin LMTO, la ecuación de Schrödinger para la red cristalina y con estas soluciones será posible calcular la energía total de la aleación.

**Hipótesis Específica:**

- a) Las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) de la aleación cristalina AlSb serán determinadas resolviendo la ecuación de Schrödinger con el método LMTO y usando un potencial efectivo propuesto Cabrera, (Cabrera, 2018).
- b) Con la estructura electrónica ya conocida se calculará la energía total de la aleación de AlSb.

#### 3.1.1 Operacionalización de variable

##### 3.1.1.a Definición conceptual de variables

La variable independiente: **Vector de onda  $k$**  ó momento cristalino, es la variable del espacio recíproco definida como  $2\pi$  rad entre la longitud de onda  $\lambda$  que es medida en metro.

La variable dependiente: **Energía**, denotada con la letra  $\epsilon$ , son los autovalores de la energía que conforma la estructura de las bandas obtenidas en las direcciones de alta simetría de la red cristalina de la aleación AlSb.

##### 3.1.1.b Definición operacional de variable

Vector de onda:  $k = 2\pi/\lambda$ , se mide en rad/m

Energía: energía de las bandas  $\epsilon$ , se mide en unidades atómicas 1Rydberg



**Tabla 1**  
Operacionalización de variables

<b>Variable dependiente</b>	<b>Dimensiones</b>	<b>Indicadores</b>	<b>Método</b>
Estructura de las bandas	Energía de las bandas	Rango de valores	Calculo LMTO
<b>Variable independiente</b>	<b>Dimensiones</b>	<b>Indicadores</b>	<b>Método</b>
Vector de onda	Direcciones cristalográficas	Rango de valores	calculo



## IV DISEÑO METODOLÓGICO

### 4.1 Tipo y diseño de la Investigación

Este proyecto acerca de la estructura electrónicas como: las bandas de energía, la densidad de estados DOS de la aleación de Aluminio-Antimonio (AISb) es una investigación teórica-básica. Técnicamente es una investigación teórica en el campo de la Física del Estado Sólido con código UNESCO 2211, Sub-campos aleaciones (221101) y semiconductores (221125). La estructura electrónica de los materiales sólidos tiene un gran auge con el desarrollo del método LMTO, inventado en la década de los 70s por el Prof. O. K. Andersen investigador del Instituto Max-Planck de Stuttgart en Alemania (Andersen et al., 1986), desarrollado en los 80s por el Prof. H. L. Skriver en Roskilde Dinamarca (Skriver, 1984). En la década de los 90s el método LMTO es implementado por el Prof. alemán Dr. H. J. Nowak (Nowak et al., 1991) en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

Los resultados del presente estudio se pueden contrastar con resultados de otras investigaciones teóricas y experimentales publicadas en libros o en revistas de la especialidad, tales como la Physica Review Letter, Physica C, Journal of Physics and Chemistry of Solids, Japanese Journal of Applied Physics, etc. Los resultados son útiles porque incrementa nuestros conocimientos acerca de la estructura electrónicas de las aleaciones semiconductores.

**4.1.1 Tipo:** investigación teórica-básica.

**4.1.2 Diseño:** La investigación se resume en:

- a) La búsqueda de la información en referencia a la aleación de Aluminio-Antimonio AISb.
- b) El cálculo del potencial efectivo usando la densidad electrónica del sólido y el cálculo de los parámetros potenciales LMTO.



- c) El cálculo de las bandas de energía y de la densidad de estados, resolviendo la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino de AISb.
- d) Cálculo de la energía total del AISb y el análisis, conclusiones de los resultados y presentación del informe final.

#### **4.2 Método de investigación**

Dada la naturaleza teórica básica de este proyecto de investigación, el método que se empleará para resolver el problema de conocer la estructura electrónica del AISb, es el método de los orbitales lineales muffin-tin o LMTO inventado por el profesor O. K. Andersen (Andersen et al., 2007) y desarrollado ampliamente por Hans L. Skriver (Skriver, 1984) .

#### **4.3 Población y muestra**

La muestra corresponde a la aleación de Aluminio-Antimonio (AISb) en su fase sólida cristalina tipo blenda de cinc (*Zinc-blende*).

#### **4.4 Lugar de estudio y periodo desarrollado**

Por motivos de la pandemia covid-19 todo el estudio se desarrolló en mi domicilio, aunque estaba previsto efectuarlo en el ambiente de laboratorio de Física de los Laboratorios de Química de la Facultad de Ingeniería Química, UNAC.

#### **4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de información**

Este proyecto es una investigación teórica básica.

#### **4.6 Análisis y procesamiento de datos**

El análisis de los resultados se efectuará mediante tablas y graficas de tipo XY



## V. RESULTADOS

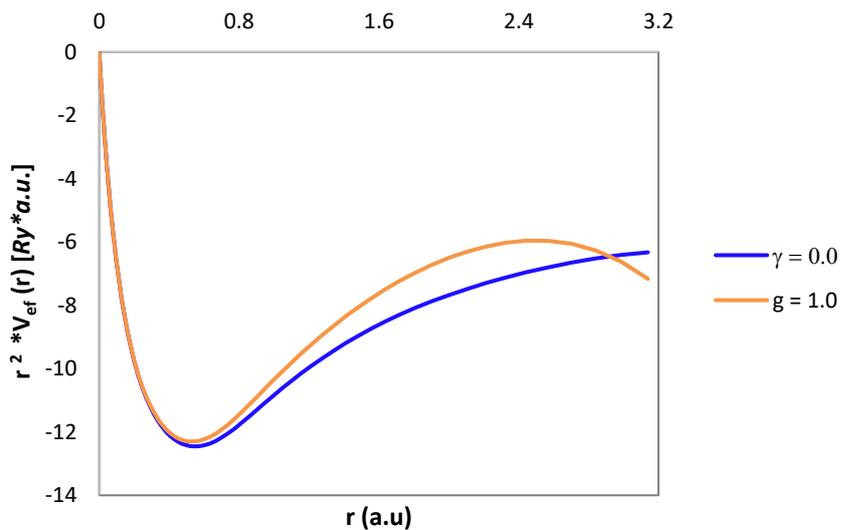
### 5.1 Resultados descriptivos

#### 5.1.1 El potencial efectivo de la red cristalina

Con la carga electrónica de aluminio y antimonio para el modelo del átomo libre obtenida con el programa en fortran ATOM.FOR (Dexclaus, 1969), que es un software de uso libre, se formuló la densidad de carga electrónica de la red cristalina de AlSb y con esta calculamos el potencial efectivo de cada átomo y de cada esfera vacía de la celda unitaria de la red cristalina. Aunque este potencial efectivo de la red cristalina usado para resolver la ecuación de Schrödinger, fue calculado para diferentes fracciones de la carga electrónica externa  $q_R$ , residiendo en su propia esfera y en las esferas vacías de la red cristalina. Los resultados del cálculo del potencial efectivo para  $\gamma = 0.0$  y  $\gamma = 1.0$ , más representativos se presentan en la Figura 5, Figura 6 y Figura 7 a continuación.

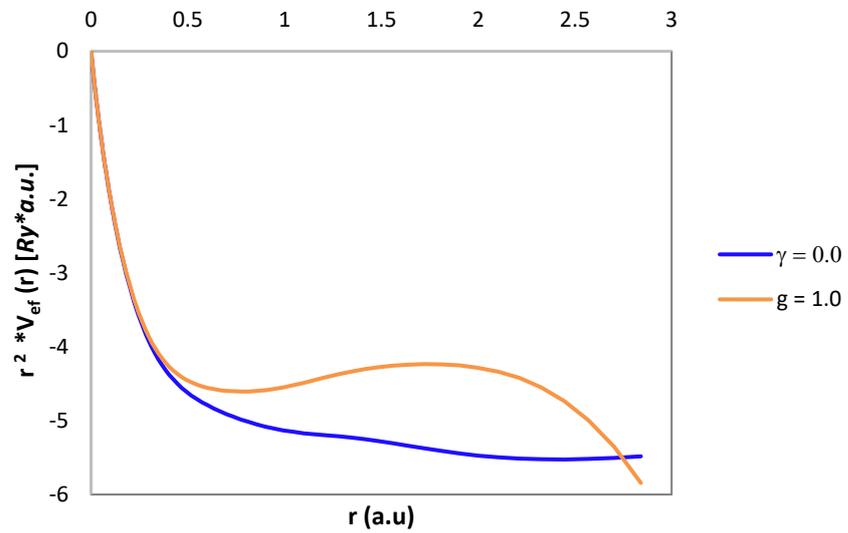
**Figura 5**

*Potencial efectivo de átomo de Antimonio en la red de AlSb.*



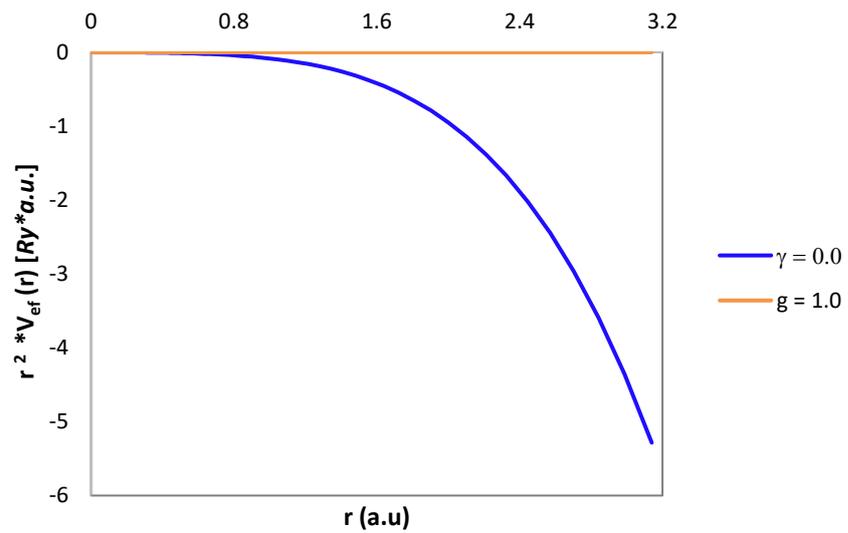
**Figura 6**

*Potencial efectivo de átomo de aluminio en la red de AlSb.*



**Figura 7**

*Potencial efectivo de esfera vacía en la red de AlSb.*



### 5.1.2 Los parámetros potenciales del método LMTO

Con este potencial efectivo ya conocido el siguiente paso es efectuar los cálculos de los parámetros potenciales del método LMTO, requeridos para una correcta formulación de la base lineal de los orbitales muffin tin, (Andersen et al., 2007). Para esto se resolvió la ecuación de Schrödinger de la red cristalina de AlSb, usando el potencial efectivo de la red cristalina ya calculados. En la Tabla 1 se muestra los parámetros potenciales más representativos y calculados para los casos de la carga electrónica externa  $q_R$  residiendo dentro de las esferas vacías de la red ( $\gamma = 0.0$ ) y para el caso de la carga electrónica  $q_R$  residiendo en su propia esfera atómica ( $\gamma = 1.0$ ).

**Tabla 2**

*Parámetros Potenciales LMTO de esferas atómicas en la red del AlSb*

Parámetro $\gamma$	Parámetros Potenciales	Antimonio			Aluminio		
		s	p	d	s	p	d
0	$\varepsilon_\mu$ (Ry)	-1.128	-0.248	1.213	-0.745	0.085	1.115
	$Q_\mu$	0.408	0.090	0.038	0.413	0.088	0.024
	$C_\mu$ (Ry)	-1.128	-0.248	1.213	-0.745	0.085	1.115
	$\Delta_\mu$ (Ry)	0.302	-0.301	0.319	0.374	-0.340	0.296
	$\rho_\mu$ (Ry <sup>-2</sup> )	0.432	0.356	0.265	0.303	0.303	0.352
1	$\varepsilon_\mu$ (Ry)	-0.883	-0.018	1.428	-0.464	0.377	1.421
	$Q_\mu$	0.410	0.092	0.040	0.416	0.090	0.026
	$C_\mu$ (Ry)	-0.883	-0.018	1.428	-0.464	0.377	1.421
	$\Delta_\mu$ (Ry)	0.320	-0.315	0.329	0.392	-0.356	0.312
	$\rho_\mu$ (Ry <sup>-2</sup> )	0.400	0.332	0.253	0.280	0.282	0.324

**Tabla 3***Parámetros Potenciales LMTO de Esferas Vacías en la red del AlSb*

Parámetro $\gamma$	Parámetros Potenciales	Esfera Vacía 1			Esfera Vacía 2		
		s	p	d	s	p	d
0	$\epsilon_{\mu}$ (Ry)	-0.007	0.801	1.941	0.113	1.091	2.470
	$Q_{\mu}$	0.404	0.093	0.039	0.404	0.093	0.039
	$C_{\mu}$ (Ry)	-0.007	0.801	1.941	0.113	1.091	2.470
	$\Delta_{\mu}$ (Ry)	0.354	0.346	0.343	0.387	0.379	0.376
	$\rho_{\mu}$ (Ry <sup>-2</sup> )	0.434	0.312	0.000	0.363	0.255	0.046
1	$\epsilon_{\mu}$ (Ry)	0.276	1.104	2.259	0.334	1.335	2.730
	$Q_{\mu}$	0.399	0.091	0.038	0.399	0.091	0.038
	$C_{\mu}$ (Ry)	0.276	1.104	2.259	0.334	1.335	2.730
	$\Delta_{\mu}$ (Ry)	0.335	0.335	0.335	0.368	0.368	0.368
	$\rho_{\mu}$ (Ry <sup>-2</sup> )	0.488	0.333	0.254	0.403	0.275	0.210

**5.1.3 Las bandas de energía del AlSb.**

Con los parámetros potenciales ya se tiene completa la base lineal de los orbitales muffins tin (LMTO) y con esta se resolvió la ecuación de Schrödinger de la red cristalina del AlSb en el espacio  $\mathbf{k}$ . Los autovalores de energía se calcularon en las direcciones cristalográficas  $\Gamma - X$ ,  $\Gamma - L$  y  $\Gamma - K$  que toma el momento cristalino  $\mathbf{k}$ , direcciones de alta simetría de la red cristalina de AlSb.

Los auto valores de energía que constituyen la estructura de las bandas de energía (relación de dispersión) calculadas para  $\gamma = 0.0$  y sus correspondientes bandas de energía asociadas presentamos en la Tabla 3, Tabla 4 y la Tabla 5, de las páginas siguientes.



**Tabla 4***Valores de las Bandas de Energía en dirección  $\Gamma - L$* 

Parámetro $\gamma = 0.0$ , dirección cristalográfica $\Gamma - L$							
k(1,1,1)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
0	-1.053	-0.263	-0.263	-0.263	-0.145	0.046	0.046
-0.05	-1.053	-0.269	-0.263	-0.263	-0.139	0.046	0.046
-0.1	-1.052	-0.286	-0.264	-0.264	-0.125	0.049	0.049
-0.15	-1.050	-0.309	-0.266	-0.266	-0.109	0.053	0.053
-0.2	-1.047	-0.334	-0.269	-0.269	-0.094	0.058	0.058
-0.25	-1.043	-0.359	-0.272	-0.272	-0.083	0.064	0.064
-0.3	-1.039	-0.385	-0.275	-0.275	-0.077	0.070	0.070
-0.35	-1.034	-0.411	-0.279	-0.279	-0.075	0.077	0.077
-0.4	-1.029	-0.436	-0.283	-0.283	-0.075	0.084	0.084
-0.45	-1.023	-0.460	-0.287	-0.287	-0.078	0.090	0.090
-0.5	-1.016	-0.484	-0.290	-0.290	-0.081	0.095	0.095
-0.55	-1.009	-0.506	-0.294	-0.294	-0.085	0.098	0.098
-0.6	-1.003	-0.527	-0.297	-0.297	-0.089	0.101	0.101
-0.65	-0.996	-0.546	-0.300	-0.300	-0.093	0.103	0.103
-0.7	-0.989	-0.563	-0.303	-0.303	-0.097	0.104	0.104
-0.75	-0.982	-0.579	-0.305	-0.305	-0.100	0.104	0.104
-0.8	-0.977	-0.592	-0.307	-0.307	-0.103	0.104	0.104
-0.85	-0.972	-0.603	-0.309	-0.309	-0.105	0.103	0.103
-0.9	-0.968	-0.611	-0.310	-0.310	-0.107	0.103	0.103
-0.95	-0.966	-0.616	-0.311	-0.311	-0.108	0.103	0.103
-1	-0.965	-0.617	-0.311	-0.311	-0.108	0.102	0.102



**Tabla 5***Valores de las Bandas de Energía en dirección  $\Gamma - X$* 

Parámetro $\gamma = 0.0$ , dirección cristalográfica $\Gamma - X$							
$k(0,1,0)$	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
0.000	-1.053	-0.263	-0.263	-0.263	-0.145	0.046	0.046
0.050	-1.053	-0.270	-0.264	-0.264	-0.137	0.044	0.048
0.100	-1.051	-0.289	-0.267	-0.267	-0.118	0.040	0.055
0.150	-1.048	-0.313	-0.273	-0.273	-0.095	0.033	0.066
0.200	-1.045	-0.338	-0.280	-0.280	-0.070	0.026	0.080
0.250	-1.040	-0.364	-0.288	-0.288	-0.048	0.019	0.097
0.300	-1.034	-0.391	-0.297	-0.297	-0.034	0.016	0.117
0.350	-1.028	-0.416	-0.306	-0.306	-0.032	0.021	0.139
0.400	-1.020	-0.441	-0.315	-0.315	-0.039	0.028	0.162
0.450	-1.012	-0.466	-0.324	-0.324	-0.048	0.030	0.187
0.500	-1.003	-0.489	-0.332	-0.332	-0.059	0.026	0.212
0.550	-0.994	-0.511	-0.340	-0.340	-0.068	0.016	0.237
0.600	-0.985	-0.532	-0.347	-0.347	-0.077	0.004	0.263
0.650	-0.975	-0.552	-0.354	-0.354	-0.085	-0.011	0.288
0.700	-0.966	-0.570	-0.359	-0.359	-0.092	-0.025	0.312
0.750	-0.957	-0.586	-0.364	-0.364	-0.097	-0.039	0.336
0.800	-0.948	-0.600	-0.368	-0.368	-0.101	-0.051	0.358
0.850	-0.941	-0.611	-0.371	-0.371	-0.104	-0.062	0.378
0.900	-0.936	-0.619	-0.374	-0.374	-0.105	-0.070	0.394
0.950	-0.933	-0.625	-0.375	-0.375	-0.105	-0.076	0.405
1.000	-0.932	-0.626	-0.375	-0.375	-0.105	-0.078	0.409



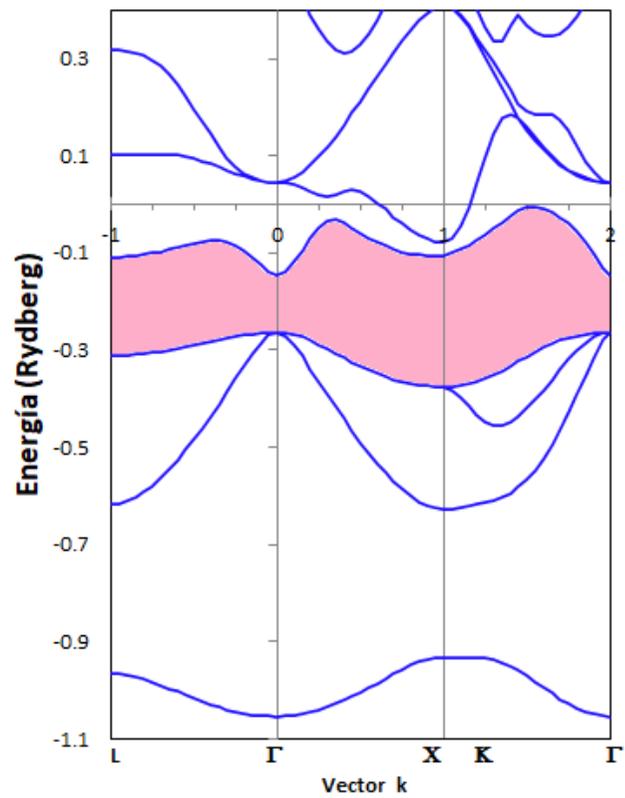
**Tabla 6***Valores de las Bandas de Energía en dirección  $\Gamma - K$* 

Parámetro $\gamma = 0.0$ , dirección cristalográfica $\Gamma - K$							
k(1,1,0)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
2.000	-1.053	-0.263	-0.263	-0.263	-0.145	0.046	0.046
1.950	-1.052	-0.279	-0.265	-0.263	-0.131	0.046	0.046
1.900	-1.049	-0.313	-0.272	-0.264	-0.103	0.049	0.049
1.850	-1.044	-0.352	-0.284	-0.266	-0.076	0.053	0.054
1.800	-1.036	-0.392	-0.300	-0.270	-0.055	0.060	0.061
1.750	-1.028	-0.429	-0.318	-0.274	-0.039	0.070	0.070
1.700	-1.017	-0.464	-0.339	-0.280	-0.026	0.082	0.083
1.650	-1.006	-0.495	-0.360	-0.287	-0.015	0.096	0.100
1.600	-0.994	-0.523	-0.381	-0.295	-0.008	0.112	0.118
1.550	-0.981	-0.547	-0.402	-0.304	-0.004	0.132	0.140
1.500	-0.969	-0.567	-0.420	-0.313	-0.006	0.154	0.161
1.450	-0.959	-0.582	-0.436	-0.323	-0.013	0.178	0.179
1.400	-0.949	-0.593	-0.447	-0.333	-0.023	0.186	0.207
1.350	-0.942	-0.601	-0.453	-0.342	-0.036	0.178	0.238
1.300	-0.937	-0.607	-0.453	-0.350	-0.049	0.144	0.270
1.250	-0.934	-0.612	-0.446	-0.358	-0.062	0.095	0.302
1.200	-0.932	-0.617	-0.433	-0.364	-0.073	0.042	0.334
1.150	-0.932	-0.621	-0.415	-0.369	-0.083	-0.007	0.363
1.100	-0.931	-0.624	-0.396	-0.372	-0.092	-0.046	0.387
1.050	-0.932	-0.626	-0.381	-0.375	-0.100	-0.071	0.403
1.000	-0.932	-0.626	-0.375	-0.375	-0.105	-0.078	0.409



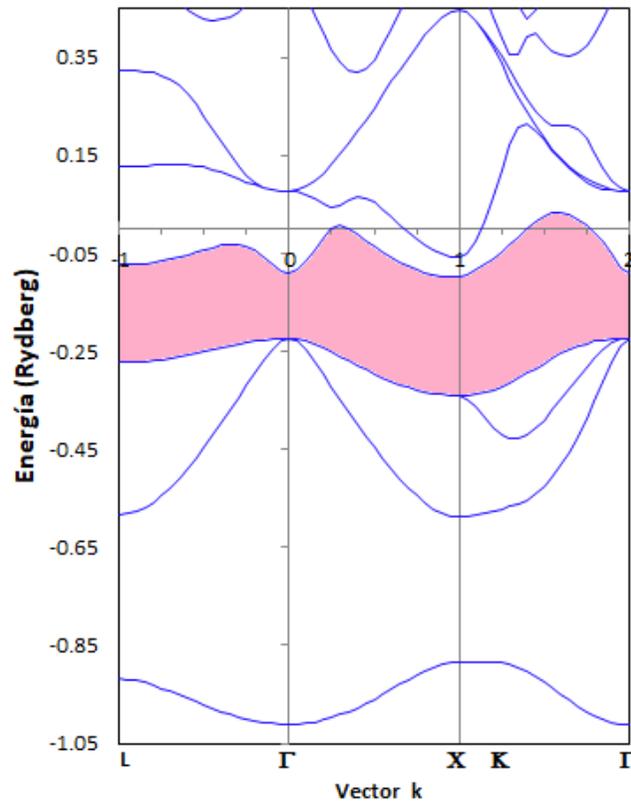
**Figura 8**

*Bandas de Energía del AlSb,  $\gamma = 0.0$*



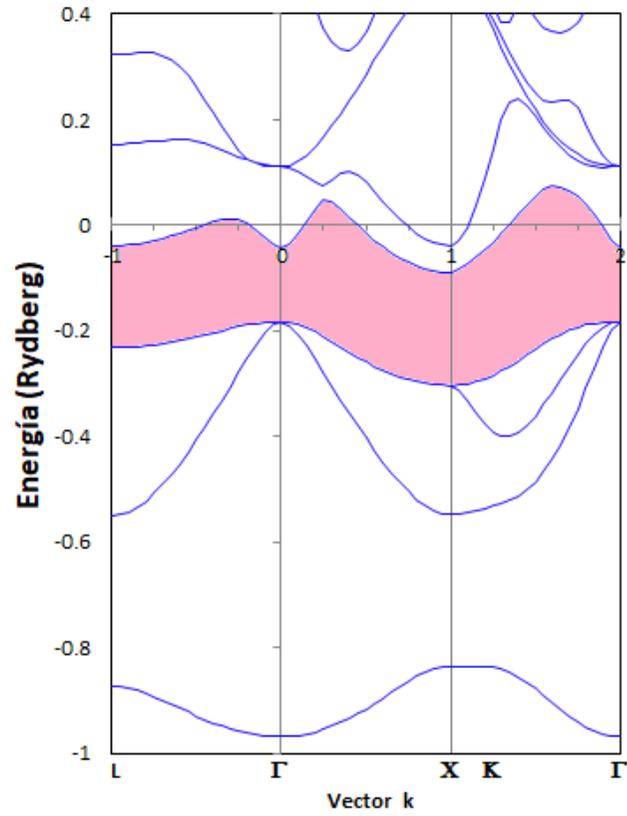
**Figura 9**

*Bandas de energía del AlSb,  $\gamma = 0.2$*



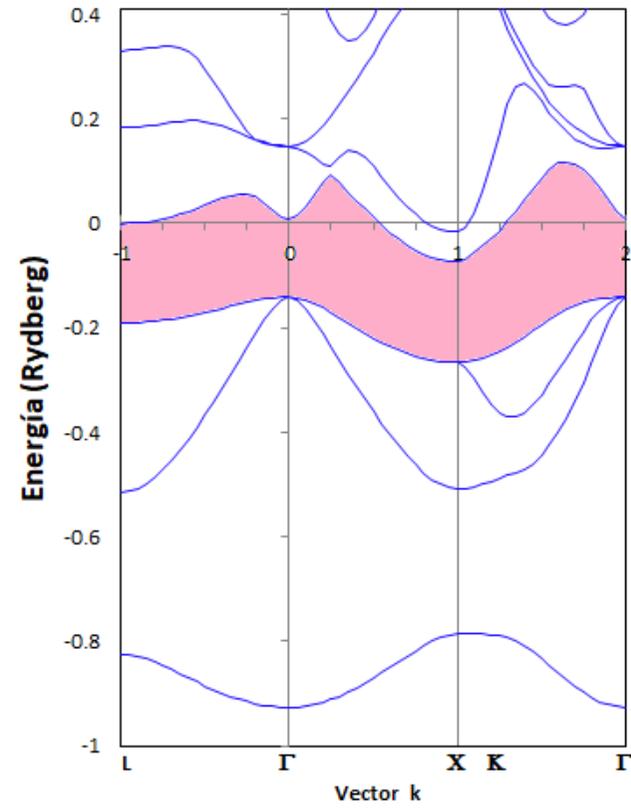
**Figura 10**

*Bandas de Energía del AlSb,  $\gamma = 0.4$*



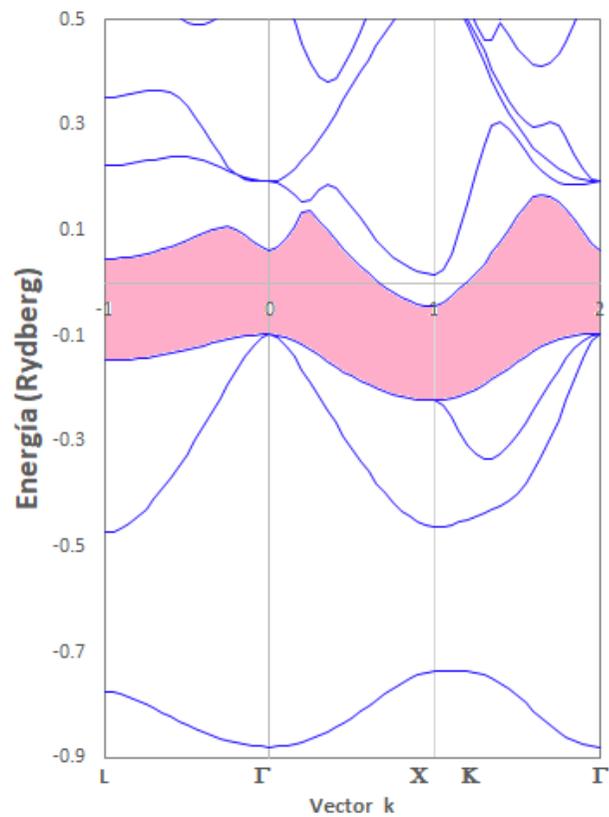
**Figura 11**

*Bandas de energía del AlSb,  $\gamma = 0.6$*



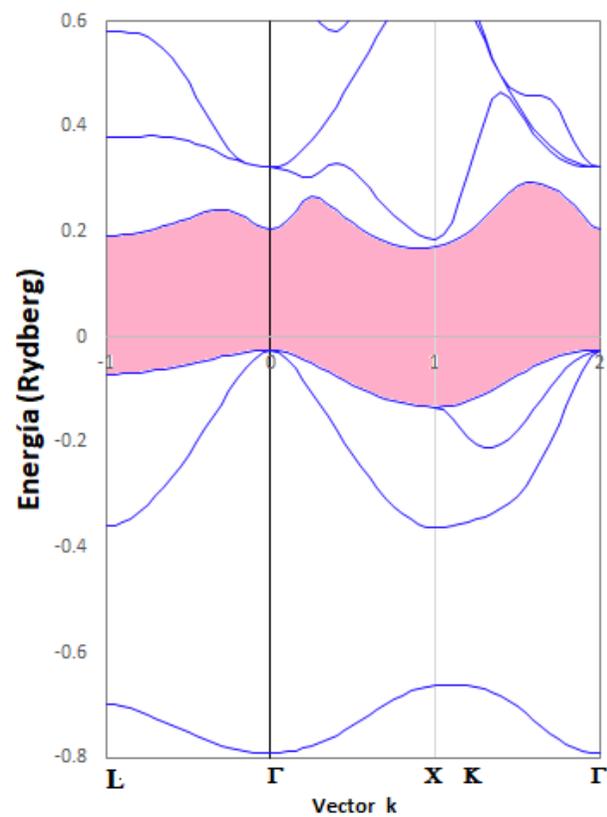
**Figura 12**

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



**Figura 13**

*Bandas de energía del AlSb,  $\gamma = 1.0$*



### 5.1.4 La densidad de estados del AlSb

Los cálculos de la densidad de estados se efectuaron para iguales valores de  $g$  usados para calcular las bandas de energía. La Tabla 6 muestra la densidad de estados obtenida para  $\gamma = 0.0$ , caso más representativo en que la toda la carga electrónica externa  $q_R$  reside en las esferas vacías de la red cristalina.

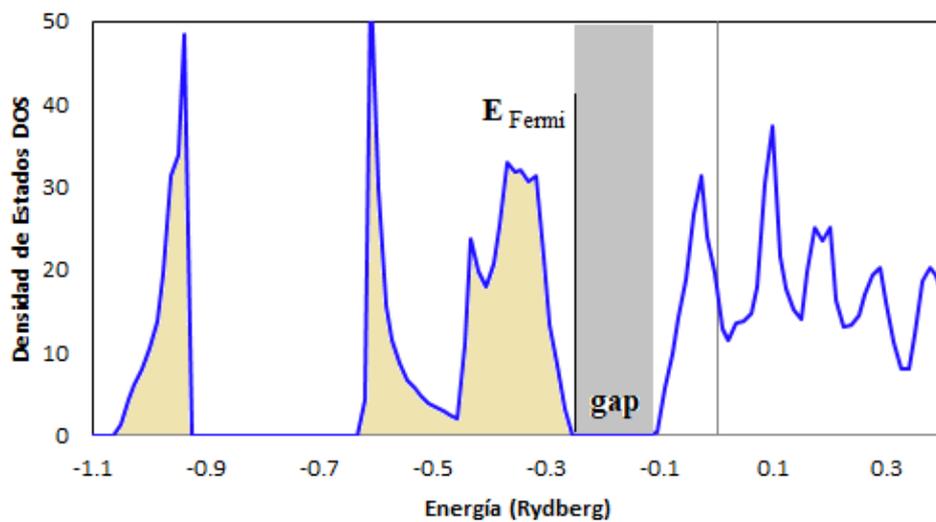
**Tabla 7**

*La Densidad de Estados Ocupados de Aleación AlSb*

Resultados de la densidad de estados para $\gamma = 0.0$							
e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)
-1.100	0.000	-0.810	0.000	-0.520	4.754	-0.230	0.000
-1.087	0.000	-0.797	0.000	-0.508	3.997	-0.218	0.000
-1.075	0.000	-0.785	0.000	-0.495	3.347	-0.205	0.000
-1.062	0.000	-0.772	0.000	-0.482	2.887	-0.192	0.000
-1.050	1.337	-0.760	0.000	-0.470	2.495	-0.180	0.000
-1.037	4.245	-0.747	0.000	-0.457	2.141	-0.167	0.000
-1.024	6.151	-0.734	0.000	-0.445	11.119	-0.155	0.000
-1.012	8.042	-0.722	0.000	-0.432	23.858	-0.142	0.001
-0.999	10.477	-0.709	0.000	-0.419	19.867	-0.129	0.043
-0.987	13.774	-0.697	0.000	-0.407	17.885	-0.117	0.142
-0.974	19.575	-0.684	0.000	-0.394	20.717	-0.104	0.524
-0.961	31.309	-0.671	0.000	-0.382	25.466	-0.092	5.640
-0.949	33.799	-0.659	0.000	-0.369	32.948	-0.079	9.883
-0.936	48.332	-0.646	0.000	-0.356	31.779	-0.066	14.363
-0.924	0.000	-0.634	0.000	-0.344	32.022	-0.054	18.799
-0.911	0.000	-0.621	4.391	-0.331	30.742	-0.041	26.679
-0.898	0.000	-0.608	55.004	-0.318	31.314	-0.029	31.373
-0.886	0.000	-0.596	29.845	-0.306	21.506	-0.016	23.936
-0.873	0.000	-0.583	15.696	-0.293	13.404	-0.003	19.481
-0.861	0.000	-0.571	11.424	-0.281	8.561	0.009	12.948
-0.848	0.000	-0.558	8.694	-0.268	3.157	0.022	11.535
-0.835	0.000	-0.545	6.765	-0.255	0.000	0.034	13.672
-0.823	0.000	-0.533	5.655	-0.243	0.000	0.047	13.711

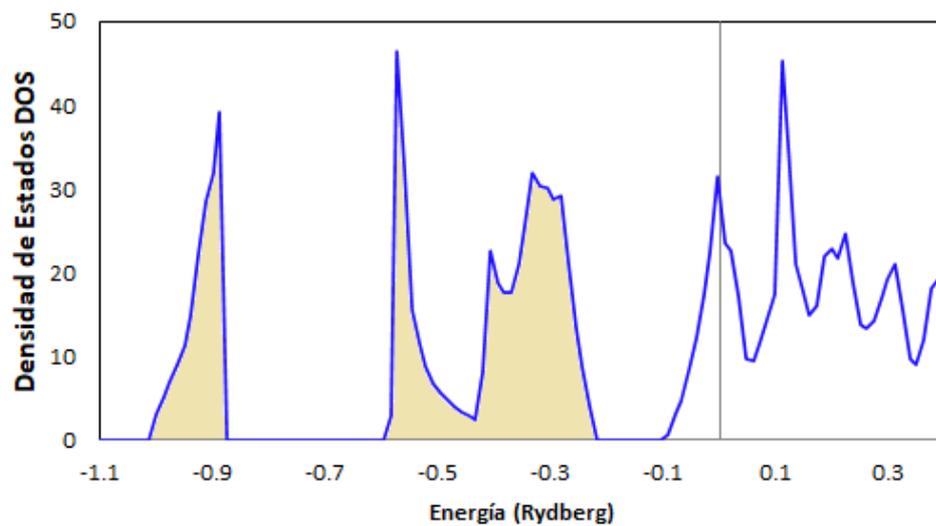
**Figura 14**

*La Densidad de Estados Aleación AlSb, calculadas con  $\gamma = 0.0$*



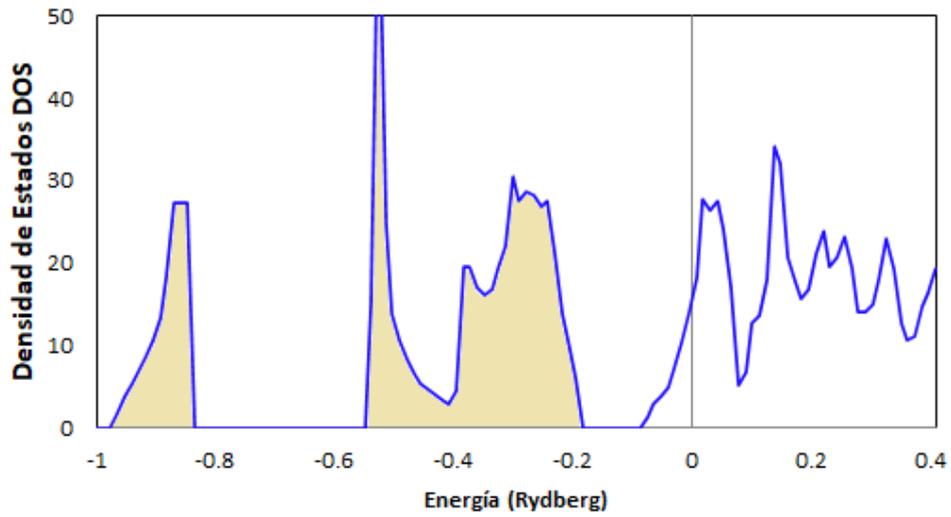
**Figura 15**

*La Densidad de Estados de Aleación AlSb, calculadas con  $\gamma = 0.2$*



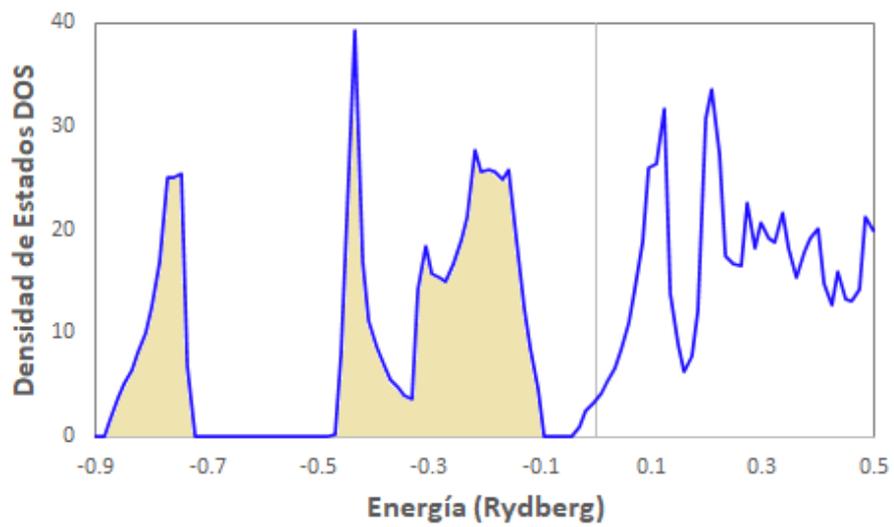
**Figura 16**

*La densidad de estados de aleación AlSb, calculadas con  $\gamma = 0.4$*



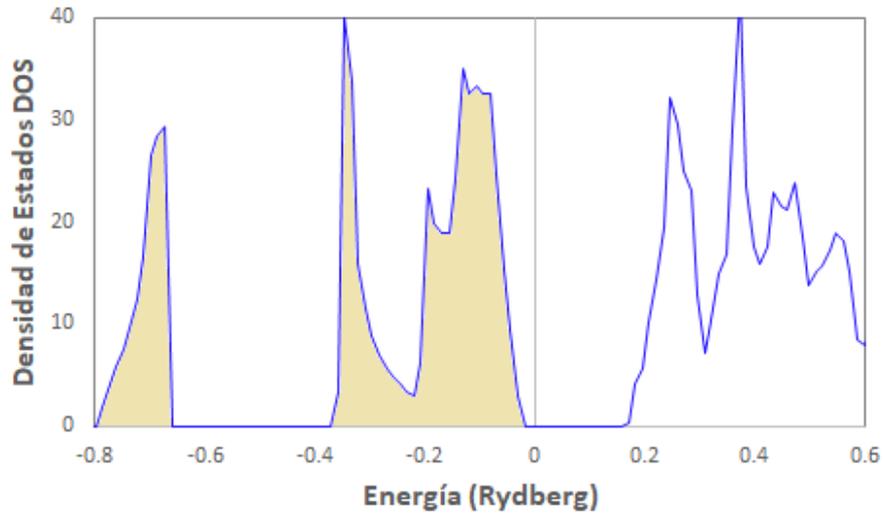
**Figura 17**

*La densidad de estados de aleación AlSb, calculadas con  $\gamma = 0.8$*



**Figura 18**

*La densidad de estados de aleación AlSb, calculadas con  $\gamma = 1.0$*



### 5.1.5 La brecha prohibida de energía

El ancho de la brecha de energía prohibida fue calculado indirectamente de la estructura de las bandas de energía y del perfil de la densidad de estados obtenidas para cada fracción de la carga electrónica  $q_R$  residiendo en las esferas vacías de la cristalina de la aleación AlSb.

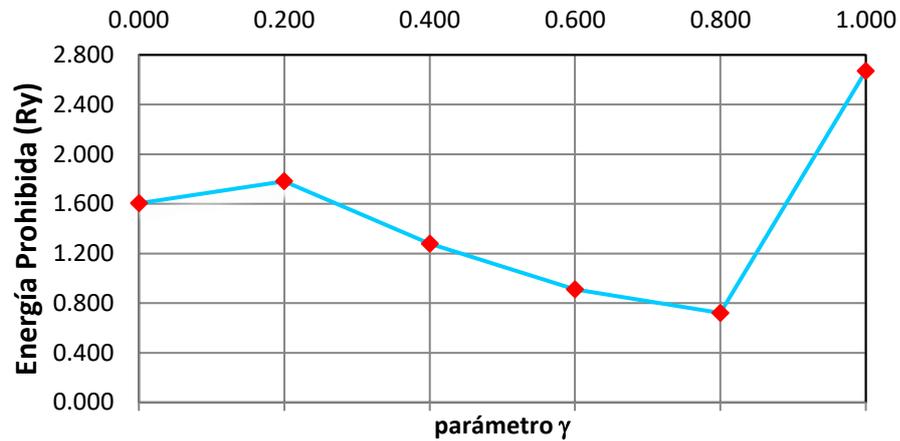
**Tabla 8**

*Brecha de Energía prohibida de Aleación AlSb.*

$\gamma$ (%)	$E_{\text{gap}}$	
	(Ry)	(eV)
0.000	0.118	1.605
0.200	0.131	1.782
0.400	0.094	1.278
0.600	0.067	0.911
0.800	0.053	0.721
1.000	0.196	2.671

**Figura 19**

*Brecha de energía prohibida de aleación AlSb.*



### 5.1.6 La energía total de aleación AlSb

Calculados los autovalores de las bandas de energía y la densidad de carga electrónica de la red cristalina, se calculó la energía total, la energía de Fermi de la red cristalina.

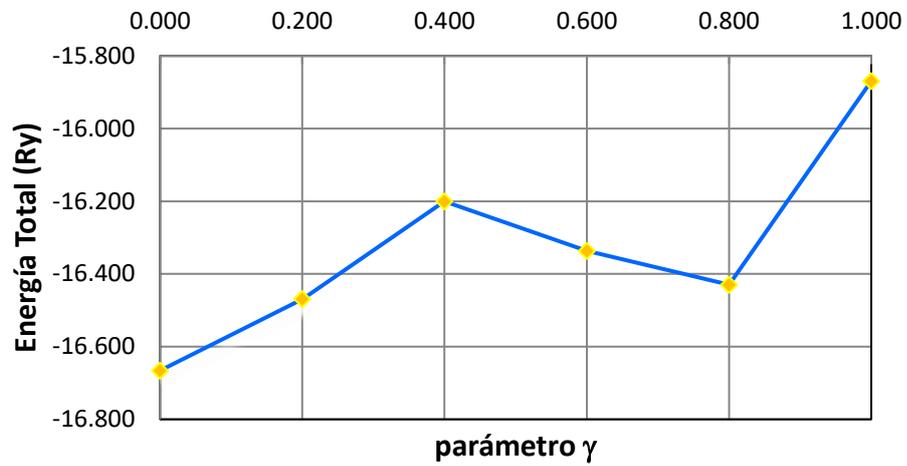
**Tabla 9**

*Energía Total de Aleación Cristalina AlSb.*

$\gamma$ (%)	$E_{\text{Total}}$ (Ry)	$E_{\text{Fermi}}$ (Ry)
0.00	-16.67	-0.26
0.20	-16.47	-0.22
0.40	-16.20	-0.18
0.60	-16.34	-0.14
0.80	-16.43	-0.10
1.00	-15.87	-0.02

**Figura 20**

*Energía Total de Aleación cristalina AlSb.*



## 5.2 Resultados inferenciales

Ninguna, la presente investigación es teórica básica.

## 5.3 Otro tipo de resultados de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis

Ninguna.

## VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

### 6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

La estructura electrónica conformada por las bandas de energía y la densidad de estados de la aleación AlSb, calculadas aquí con el método de los orbitales lineales muffins tin (LMTO) resultaron ser muy buenos, con un perfil similar a lo ya obtenido por otros estudios con métodos diferentes, lo que demuestra la hipótesis esta investigación acerca del método LMTO. De los resultados obtenidos aquí y presentados en la página 47, la estructura de las bandas de energía calculada en las direcciones cristalográficas  $\Gamma - L$ ,  $\Gamma - X$ ,  $\Gamma - K$  de alta simetría de la red cristalina blenda de cinc y con  $\gamma = 0.0$ , es la más representativa ya que esta minimiza la energía total de la aleación cristalina de AlSb. Este caso corresponde a toda la pequeña fracción de la carga electrónica externa  $q_R$  residiendo en las esferas vacías de la diagonal de la red cristalina de AlSb.

La brecha de energía prohibida de esta aleación AlSb se obtuvo indirectamente de la estructura de las bandas de energía calculadas para los diferentes valores del parámetro  $\gamma$ . Desde la Figura 8 hasta la Figura 13 (véase las páginas 47, 48 y 49) las bandas de energía evidencian la existencia de una brecha de energía prohibida (*gap*) entre el valor tope de la banda de valencia en el punto de simetría X y el mínimo de la banda de conducción en el punto de simetría  $\Gamma$ . La brecha (*gap*) de las bandas de energía calculada para  $\gamma = 0$ , es directa de 0.118 Ry, que equivale a 1.605 eV resultado próximo al valor experimental de 1.696 eV reportado por Vurgaftman (Vurgaftman, Meyer, & Ram-Mohan, 2001), o al valor de 1.686 eV reportado por Wang, (Wang Y. , 2013).

La estructura de las bandas de energía calculada con  $\gamma = 0.2$  resultó con una brecha indirecta de energía prohibida entre los puntos de alta simetría  $\Gamma - X$ , de 0.131 Ry, que equivale a 1.786 eV que se ajusta bien al valor experimental antes mencionado, pero esta estructura no minimiza la energía total de esta aleación



cristalina de AlSb. Las otras bandas de energía calculadas para otros valores de  $\gamma$  presentaron una menor brecha de energía prohibida: de 0.094 Ry, que equivale a 1.278 eV obtenida con  $\gamma = 0.4$ ; de 0.067 Ry, que equivale a 0.911 eV obtenida con  $\gamma = 0.6$ ; de 0.053 Ry que equivale a 0.721 eV obtenida con  $\gamma = 0.8$  y de 0.196 Ry que equivale a 2.67 eV obtenida con  $\gamma = 1.0$ , lo que prueba que se puede determinar la estructura electrónica resolviendo la ecuación de Schrödinger de la red cristalina con el método LMTO.

La densidad de estados de la aleación de AlSb calculada con  $\gamma = 0.0$  resultó con un perfil que evidencia y confirma la brecha de energía prohibida de 0.118 Ry que equivale a 1.605 eV, lo que demuestra la naturaleza semiconductor de esta aleación de AlSb. Por otro lado, la DOS calculadas para otros valores de aquella fracción de la carga electrónica externa  $q_R$  residiendo en las esferas vacías de la red cristalina, resultaron con un corrimiento hacia mayores valores de energía con una brecha de energía prohibida que disminuye hasta  $\gamma = 0.8$  y crece abruptamente con  $\gamma = 1.0$ .

La energía total de esta aleación cristalina de AlSb fue calculada para cada una de las bandas de energía obtenidas con las diferentes fracciones de la pequeña carga electrónica externa  $q_R$  residiendo en las esferas vacías de la red cristalina. Esta aleación cristalina de AlSb resultó con energía total mínima de  $-16.67$  Ry calculada con la estructura de las bandas de energía obtenida para  $\gamma = 0.0$ . La energía total de esta aleación calculada para los otros valores de  $\gamma$ , resultaron con unos valores de pequeña diferencia respecto de la energía total obtenida para el caso de  $\gamma = 0.0$ , pero la energía total calculada para la estructura electrónica obtenida con  $\gamma = 1.0$  presenta un cambio apreciable de  $-15.87$  Ry asociada con una densidad de estados con brecha de energía prohibida de 2.67 eV. En la Tabla 8 de la página 54 se pueden apreciar los otros valores de la energía total y su correspondiente gráfica en la Figura 20 de la página 55.



## **6.2 Contrastación de hipótesis con otros estudios similares**

La estructura de las bandas de energía y su correspondiente densidad de estados obtenidas con  $\gamma = 0.0$  y asociadas a la energía total mínima de  $-16.67$  Ry, resultaron con brecha de energía prohibida directa de  $0.118$  Ry, equivalente a  $1.605$  eV, resultado no tan alejado del gap experimental para AlSb de  $1.696$  eV (Vurgaftman et al., 2001) pero con una diferencia del  $5.4\%$ . En un reciente artículo aunque M. Caid predice una brecha directa de energía prohibida de  $1.18$  eV para esta aleación de AlSb (Caid & Rached, 2020), nuestro resultados es comparable al valor teórico de  $1.686$  eV obtenido por Wang, (Wang et al., 2013a), obtenida con el modelo de la energía de intercambio semilocal modificada de Becke-Johnson. Los resultados obtenidos aquí demuestran que el método LMTO empleado en los cálculos de la estructura electrónica es el adecuado para un estudio de las propiedades electrónicas de sólidos y aleaciones materiales.

## **6.3 Responsabilidad ética**

Se obtuvieron resultados propios acerca de la estructura electrónica de la aleación AlSb. Esta investigación se desarrolló respetando todos los derechos de autoría y además se usó software libre para efectuar los cálculos.



## CONCLUSIONES

- a) La estructura electrónica de AlSb calculada para  $\gamma = 0.0$  evidencia una brecha de energía prohibida de 0.118 Ry, que equivale a 1.605 eV y que se ajusta bien a 1.696 eV que es el valor experimental reportado en la literatura de especialidad (Vurgaftman et al., 2001). Energía prohibida que fue obtenida cuando toda la pequeña fracción de la carga electrónica externa de las esferas atómicas reside de forma homogénea en las esferas vacías de la red cristalina del AlSb. La densidad de estados calculado para  $\gamma = 0.0$  resulto con un perfil que se ajusta a lo reportado en la literatura obtenidos con otros métodos, está DOS confirma tanto el carácter semiconductor, así como la brecha de energía prohibida obtenida en las bandas de energía de esta aleación de AlSb.
- b) La energía total de -16.67 Ry calculada con la estructura electrónica obtenida con  $\gamma = 0.0$  resulta la energía total mínima, lo que confirma una mayor estabilidad del sistema cristalina para esta brecha de energía prohibida que se ajusta bien a lo reportado en la literatura de especialidad.
- c) El método de los orbitales lineales muffins tin, LMTO, constituye una buena herramienta que se adapta bien para los cálculos de la estructura electrónica y de sus parámetros de estructura como la brecha de energía prohibida en las direcciones de alta simetría de la red cristalina de esta aleación de AlSb.



## RECOMENDACIONES

El estudio teórico de la estructura electrónica de los materiales y sus aleaciones es resulta económico de implementar, se necesita contar una computadora personal con algún lenguaje de programación de preferencia fortran 90 en adelante, con sus respectivos compiladores, además contar con el software libre ATOM.FOR que permite obtener la densidad de carga electrónica del átomo libre del material monoatómico requerido.

El método de los orbitales lineales Muffin-tin, conocido como método LMTO es muy recomendable para determinar la estructura electrónica de materiales, este se ajusta muy cuando se trata de resolver la ecuación de Schrödinger de la red cristalina de una aleación cristalina, además porque resulta ser económico, práctico, eficiente y de bajo costo económico, puesto que solo requiere de una computadora personal, de un compilador fortran y del software de cálculo LMTO que ya existe como software libre.



## REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Andersen, O. K., Pawłowska, Z., & Jepsen, O. (1986). Illustration of the linear-muffin-tin-orbital tight-binding representation: Compact orbitals and charge density in Si. *Physical Review B*, 34(8), 5253–5269.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.5253>
- Andersen, O. K., Saha-Dasgupta, T., Tank, R. W., Arcangeli, C., Jepsen, O., & Krier, G. (2007). Developing the MTO Formalism. In *Electronic Structure and Physical Properties of Solids* (Issue 1, pp. 3–84). Springer Berlin Heidelberg. [https://doi.org/10.1007/3-540-46437-9\\_1](https://doi.org/10.1007/3-540-46437-9_1)
- Cabrera Arista, C. (2019). *Calculo de la estructura electronica y de la energía total de los sistemas cristalinos de Ge, GaP y SiC* [Universidad Nacional Mayor de San Marcos]. <https://hdl.handle.net/20.500.12672/10748>
- Cabrera, C. (2018). Estructura electrónica en aleación de AIP calculada con el método LMTO. *Revista de Investigación de Física*, 21(1), 1–4.  
[https://fisica.unmsm.edu.pe/rif/previo\\_files/2018-1/RIF-182101101.pdf](https://fisica.unmsm.edu.pe/rif/previo_files/2018-1/RIF-182101101.pdf)
- Cabrera, C. (2020). Estructura electrónica de aleación AlAs con red zincblende, calculadas con el método LMTO. *Revista de Investigación de Física*, 23(1), 18–23. [https://doi.org/fisica.unmsm.edu.pe/rif/previo\\_files/2020-1/03cabrera.pdf](https://doi.org/fisica.unmsm.edu.pe/rif/previo_files/2020-1/03cabrera.pdf)
- Caid, M., & Rached, D. (2020). First-principles calculations to investigate structural, electronic and optical properties of (AlSb)<sub>m</sub>/(GaSb)<sub>n</sub> superlattices. *Materials Science- Poland*, 38(2), 320–327.  
<https://doi.org/10.2478/msp-2020-0027>
- Domínguez, F. (Universidad C. M. (2001). *Física del Estado Sólido* (M. T. Gomez-Mascaraque (ed.); Paraninfo, pp. 85–87). Thomson Learnig.
- Fritsche, L. (1991). Excitations in a generalized density functional theory. *Physica B: Condensed Matter*, 172(1), 7–17.  
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0921-4526\(91\)90410-G](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0921-4526(91)90410-G)
- Harrison, W. A. (1960). Band Structure of Aluminum. *Phys. Rev.*, 118(5), 1182–1189. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.118.1182>

- Hinuma, Y., Kumagai, Y., Tanaka, I., & Oba, F. (2017). Band alignment of semiconductors and insulators using dielectric-dependent hybrid functionals: Toward high-throughput evaluation. *Physical Review B*, 95(7).  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.075302>
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Jackson, J. D. (2021). *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- Jivani, A. R., Trivedi, H. J., Gajjar, P. N., & Jani, A. R. (2005). Total energy, equation of state and bulk modulus of AlP, AlAs and AlSb semiconductors. *Pramana*, 64(1), 153–158. <https://doi.org/10.1007/BF02704540>
- Kohn, W. (1965). W. Kohn and LJ Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965). *Phys. Rev.*, 140, A1133.
- Kohn, W. (1999). Nobel lecture: Electronic structure of matter - Wave functions and density functional. *Reviews of Modern Physics*, 71(5), 1253–1266.  
<https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.1253>
- Kohn, W., Becke, A. D., & Parr, R. G. (1996). Density functional theory of electronic structure. *Journal of Physical Chemistry*, 100(31), 12974–12980.  
<https://doi.org/10.1021/jp9606691>
- MacLaren, J. M., Clougherty, D. P., McHenry, M. E., & Donovan, M. M. (1991). Parameterised local spin density exchange-correlation energies and potentials for electronic structure calculations I. Zero temperature formalism. *Computer Physics Communications*, 66(2–3), 383–391. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(91\)90084-X](https://doi.org/10.1016/0010-4655(91)90084-X)
- Melendez Martinez, J. J. (Universidad de E. (2012). *Física del Estado Sólido* (1st ed.). Coleccion manuales uex-74.
- Mendoza-Estrada, V., Romero-Baños, M., Dovale-Farelo, V., López-Pérez, W., González-García, Á., & González-Hernández, R. (2017). Structural, elastic, electronic and thermal properties of InAs: A study of functional density. *Revista Facultad de Ingeniería*, 26(46), 81–91.  
<https://doi.org/10.19053/01211129.v26.n46.2017.7320>



- Nowak, H. J., Andersen, O. K., Fujiwara, T., Jepsen, O., & Vargas, P. (1991). Electronic-structure calculations for amorphous solids using the recursion method and linear muffin-tin orbitals: Application to Fe<sub>80</sub>B<sub>20</sub>. *Physical Review B*, 44(8), 3577–3598. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.3577>
- Parr, R. G. (1989). *Density-functional theory of atoms and molecules*.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Perdew, J. P., & Kurth, S. (2003). *Density Functionals for Non-relativistic Coulomb Systems in the New Century* (pp. 1–55). [https://doi.org/10.1007/3-540-37072-2\\_1](https://doi.org/10.1007/3-540-37072-2_1)
- Remediakis, I. N., & Kaxiras, E. (1999). Band-structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 59(8), 5536–5543. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.5536>
- Skriver, H. L. (1984). *The LMTO Method* (Vol. 1). Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-81844-8>
- Tran, F., & Blaha, P. (2009). Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange–correlation potential. *Physical Review Letters*, 102(22), 5–8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.226401>
- Vu, T. N., Nayak, S. K., Nguyen, N. T. T., Alpay, S. P., & Tran, H. (2021). Atomic configurations for materials research: A case study of some simple binary compounds. *AIP Advances*, 11(4). <https://doi.org/10.1063/5.0044180>
- Vurgaftman, I., Meyer, J. R., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11 D), 5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
- Wang, Zi (Faculteit der Natuurwetenschappen, W. en I. (2009). First-principles electronic structure theory , Graphene calculations. *Transport*.
- Wang, Y., Yin, H., Cao, R., Zahid, F., Zhu, Y., Liu, L., Wang, J., & Guo, H. (2013a). Electronic structure of III-V zinc-blende semiconductors from first

principles. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*,  
87(23), 235203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.235203>

Wang, Y., Yin, H., Cao, R., Zahid, F., Zhu, Y., Liu, L., Wang, J., & Guo, H.  
(2013b). Electronic structure of III-V zinc-blende semiconductors from first  
principles. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*,  
87(23). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.235203>



## ANEXOS

Unidades y equivalencias usadas en este trabajo

$$1.0 \text{ au} = 1.0 \text{ atomic-unit} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} = a_0 \text{ (radio de Bohr)}$$

$$1.0 \text{ eV} = 1.0 \text{ electrón-Volt} = 1.60219 \times 10^{-19} \text{ J (Unidad de energía atómica)}$$

$$1.0 \text{ Ry} = 13.6058 \text{ eV (Subunidad de energía atómica)}$$

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

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

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

Siglas usadas

*a.u.* = *atomic unit*: unidad atómica de distancia

AlSb = Símbolo de aleación binaria de Aluminio-Antimonio.

*Zinblende* = red cristalina tipo blenda de cinc ó ZnS.

DFT = *Density Functional Theory*

KSE = *Kohn-Sham equation*

LMTO = *Linear Muffin-Tin Orbitals*

DOS = *Density Occupied States*

LDA = *Local Density Approximation*

ASA = *Atomic Sphere Approximation*

FCC = *Face Center Cubic*

$\psi_\alpha$  = función de onda de orbital atómico con número cuántico  $\alpha$

$\varepsilon_\alpha$  = auto-valor de energía (en *a.u.*) del orbital con número cuántico  $\alpha$



**ANEXOS: MATRÍZ DE CONSISTENCIA**  
**ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE ALEACIÓN ALUMINIO-ANTIMONIO AISb CALCULADA CON EL METODO LMTO**

<b>PROBLEMA GENERAL</b>	<b>OBJETIVO GENERAL</b>	<b>HIPOTESIS GENERAL</b>	<b>VARIABLE</b>	<b>INDICADORES</b>	<b>METODOLOGIA A UTILIZAR</b>
¿Es posible conocer la estructura electrónica de la aleación sólida Aluminio-Antimonio con fase cristalina tipo <i>zincblende</i> ?	Hallar las propiedades electrónicas de la aleación de AISb con fase cristalina tipo <i>zincblende</i> .	Es posible conocer la estructura electrónica de la aleación AISb usando el método LMTO para resolver la ecuación de Schrödinger del sólido.	<b>V. INDEPENDIENTE</b> Vector de onda o momento cristalino de las funciones de onda	ninguno	Método LMTO
<b>PROBLEMAS ESPECIFICOS</b>	<b>OBJETIVOS ESPECIFICOS</b>	<b>HIPOTESIS ESPECIFICAS</b>	<b>VARIABLES</b>	<b>INDICADORES</b>	<b>METODOLOGIA A UTILIZAR</b>
¿Se podrá hallar las bandas de energía y las DOS de la aleación AISb con una fase cristalina de tipo <i>zincblende</i> ?	Calcular las bandas de energía y la densidad de estados DOS de la aleación cristalina Aluminio-Antimonio	Al resolver la ecuación de Schrödinger de la red cristalina con el método LMTO permite obtener las bandas de energía y la densidad de estados del AISb.	La energía de los estados electrónicos del sistema	ninguno	Método LMTO
¿Será posible calcular la energía total del estado fundamental de la aleación AISb?	calcular la energía total de la aleación AISb con fase cristalina tipo <i>zincblende</i> .		La energía total del sistema	ninguno	Método de integración de Simpson