

217

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

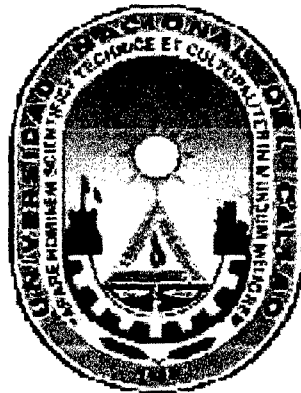
FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA

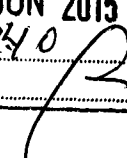
INSTITUTO DE INVESTIGACION DE LA FIQ



JUN 2015

1110
May 04/06/2015
11.50 h
150



R E C I B I D O	UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
	VICE-RECTORADO DE INVESTIGACIÓN
	136 10 JUN 2015
	HORA: 12:40 FIRMA: 

INFORME FINAL DEL PROYECTO DE INVESTIGACION

**ESTRUCTURA ELECTRONICA Y
TRANSICIONES DE FASE EN ALEACION DE
ALUMINIO-FOSFORO (AIP)**

AUTOR: Lic. CESAR CABRERA ARISTA

(PERIODO DE EJECUCION: Del 1 de Marzo del 2014 al 31 de Mayo del 2015)

(Resolución Rectoral N° 228-2014-R)

Callao, 2015

I INDICE

	Pág.
I: ÍNDICE	1
1.1 Índice de tablas	3
1.2 Índice de graficas y figuras	4
II: RESUMEN	5
2.1 Resumen	5
2.2 Abstract	6
III.- INTRODUCCION	7
3.1 Planteamiento del problema	8
3.1.1 Enunciado del problema	9
3.1.2 Objetivo general	9
3.1.3 Objetivos específicos	10
3.1.4 Alcance de la investigación	10
3.2 Importancia y Justificación	11
IV: MARCO TEÓRICO	12
4.1 Teoría del funcional densidad	12
4.2 La energía total del sistema	16
4.3 El potencial efectivo	19
4.4 El potencial del solido cristalino	20
4.5 La carga electrónica en el sólido	23
4.6 Los parámetros potenciales	25
4.7 La densidad de estados (DOS)	27



V: MATERIALES	31
5.1 Materiales	31
5.2 Métodos	31
VI: RESULTADOS	33
6.1 El potencial efectivo	33
6.2 La estructura de las bandas de energía	42
6.3 La densidad de estados – DOS	48
6.4 La energía prohibida	56
6.5 La energía total	57
VII: DISCUSION	58
7.1 El potencial efectivo	58
7.2 Las bandas de energía	59
7.3 La densidad de estados – DOS	61
7.4 La energía prohibida y transición de fase	63
7.5 La energía total	64
VIII: REFERENCIALES	66
IX: APENDICES	68
9.1 Apéndice A	68
9.2 Apéndice B	70
9.1 Apéndice C	71
XI: ANEXOS	72



1.1 Índice de tablas	Pág.
TABLA N° 6.1: El potencial efectivo – LDA, Esferas de Fosforo	33
TABLA N° 6.2: El potencial efectivo – LDA, Esferas de Aluminio	36
TABLA N° 6.3: El potencial efectivo – LDA, Esferas Vacías	39
TABLA N° 6.4: Las bandas de energía del AIP, para $\gamma = 0.0$, (L - Γ)	45
TABLA N° 6.5: Las bandas de energía del AIP, para $\gamma = 0.0$, (Γ - X)	46
TABLA N° 6.6: Las bandas de energía del AIP, para $\gamma = 0.0$, (Γ - K)	47
TABLA N° 6.7: La Densidad de estados DOS de AIP, para $\gamma = 0.0$	48
TABLA N° 6.8: La Densidad de estados DOS de AIP, para $\gamma = 1.0$	55
TABLA N° 6.9: La brecha de energía prohibida del AIP	56
TABLA N° 6.10: La Energía total del AIP	57
TABLA N° 9.1: Los parámetros potenciales del AIP $\gamma = 0.0$	68
TABLA N° 9.2: Los parámetros potenciales esferas vacías $\gamma = 0.0$	68
TABLA N° 9.3: Los parámetros potenciales del AIP $\gamma = 1.0$	69
TABLA N° 9.1: Los parámetros potenciales esferas vacías $\gamma = 1.0$	69



1.2 Índice de graficas y figuras	Pág.
Figura N° 4.1 Estructura cristalina del AIP	21
Grafica N° 6.1 Potencial efectivo LDA átomos de fosforo	35
Grafica N° 6.2 Potencial efectivo LDA átomos de Aluminio	38
Grafica N° 6.3 Potencial efectivo LDA esferas vacías	41
Grafica N° 6.4 Bandas de energía del AIP $\gamma = 0.0$	42
Grafica N° 6.5 Bandas de energía del AIP $\gamma = 0.2$	43
Grafica N° 6.6 Bandas de energía del AIP $\gamma = 0.4$	43
Grafica N° 6.7 Bandas de energía del AIP $\gamma = 0.8$	44
Grafica N° 6.8 Bandas de energía del AIP $\gamma = 1.0$	44
Grafica N° 6.9 Densidad de Estados del AIP $\gamma = 0.0$	49
Grafica N° 6.10 Densidad de Estados del AIP $\gamma = 0.2$	50
Grafica N° 6.11 Densidad de Estados del AIP $\gamma = 0.4$	51
Grafica N° 6.12 Densidad de Estados del AIP $\gamma = 0.6$	52
Grafica N° 6.13 Densidad de Estados del AIP $\gamma = 0.8$	53
Grafica N° 6.14 Densidad de Estados del AIP $\gamma = 1.0$	54
Grafica N° 6.15 Ancho de energía prohibida del AIP	56
Grafica N° 6.16 Energía total del AIP	57
Grafica N° 10.1 Bandas de energía del AIP Resultados de Yin Wang [21]	72

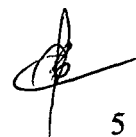


II RESUMEN

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

De los resultados obtenidos, para la máxima transferencia de la carga electrónica hacia las regiones de menor ocupación en la red cristalina, de toda la carga que está más allá del radio de las esferas atómicas, se obtiene un excelente perfil de la estructura electrónica, que además está desplazada hacia regiones de energía más profundas, con una energía total mínima de $-19.138Ry$ por celda unitaria. Para este valor de energía mínima, la región de energía prohibida tiene una brecha de $0.188 Rydberg$, que equivale a $2.56 eV$, un valor cercano al gap experimental de $2.43 eV$ que existe en la literatura.

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



2.2 ABSTRACT

The present investigation has been a theoretical study of the electronic structure of the binary compound of solid AIP with crystal structure of type zinc blende. Forbidden energy has been indirectly determined from the calculation of the electronic structure: energy bands and the density of States (DOS) in the ground state ($T = 0$ K) using the method of the orbital linear muffin-tin (LMTO).

The results, for the maximum transfer of electronic charge towards the regions of lower occupancy in the Crystal network, all cargo which is beyond the radius of Atomic spheres, you get an excellent profile of the electronic structure, which is displaced towards deeper regions of energy, with a minimum total energy - 19 138Ry per unit cell. For this value of minimum energy, the forbidden energy region has a gap of 0.188 Ry, amounting to 2.56 eV, a value close to the experimental gap from 2.43 eV that exists in the literature.

Keywords: Crystalline solids, bands of energy, density of States.



III INTRODUCCION

El conocimiento de las propiedades electrónicas de los materiales y de aleaciones solidas es de gran importancia en la posible aplicación tecnológica de un material y de profunda influencia en las aplicaciones tecnológicas de las aleaciones semiconductoras. El desarrollo tecnológico ha llevado a la búsqueda de nuevos materiales con mejores propiedades electrónicas que las de los materiales semiconductores de gran uso como: el Carbón, Silicio y Germanio; creando gran interés por conocer y determinar las propiedades electrónicas de las diversas aleaciones semiconductoras, y en particular de la aleación aluminio-fósforo (AlP). Recientemente en la década pasada, en varias universidades del mundo se han realizado diferentes trabajos de investigación con el fin de establecer las propiedades electrónicas de la aleación Aluminio-Fósforo (AlP), tales como: Electronic structure of AlP under pressure using semiempirical method de H. R. Jappor [1]; Total energy, equation of states and bulk modulus of AlP, AlAs and AlSb Semiconductors de A. R. Jivani [2]; Band-Structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory de I. N. Remediakis [3]; usando métodos teóricos y técnicas experimentales muy sofisticadas y de alto costo para nuestro medio.



7

Aunque el Perú carece de equipos experimentales sofisticados para realizar estudios experimentales sobre las propiedades electrónicas, es posible realizar una investigación teórica sobre la estructura electrónica de la aleación aluminio-fósforo (AlP) y usar la estructura electrónica para analizar de forma indirecta una posible transición de fase de la aleación aluminio-fósforo AlP.

Las propiedades electrónicas de esta aleación de aluminio-fósforo se puede determinar usando el método LMTO, inventado en la década de los 70s por el Prof. O. K. Andersen investigador del Instituto Max-Planck de Stuttgart en Alemania y desarrollado en los 80s por el Prof. H. L. Skriver [4] en Roskilde Dinamarca. Hasta mediados de la década de los 90s el método LMTO es implementado por el Prof. alemán Dr. H. J. Nowak [5] en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

3.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Las posibles aplicaciones tecnológicas de la aleación aluminio-fósforo (AlP) depende principalmente de sus propiedades electrónicas (la estructura de las bandas de energía, la densidad de estados y de la brecha de la región de energía prohibida), de los cambios físicos que experimente el material bajo la acción de fuerzas y campos externos. Ciertamente el problema de conocer las propiedades electrónicas y los posibles cambios físicos de esta aleación radica en el alto riesgo de manipular la muestra y del gran costo económico de los equipos y de las

técnicas experimentales a usar para determinar las propiedades electrónicas. Por tanto el modelo empleado por C. Cabrera [7], resulta económicamente ventajoso realizar una investigación teórica que minimice los riesgos y nos permita determinar las propiedades electrónicas de la aleación aluminio-fósforo usando un método conocido y que esté al alcance.

3.1.1 ENUNCIADO DEL PROBLEMA

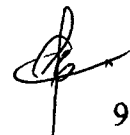
¿Es posible determinar las propiedades electrónicas de la aleación aluminio-fósforo usando el método LMTO y con ellas analizar la posible transición de fase de ésta aleación?

3.1.2 OBJETIVO GENERAL

Realizar un estudio de las propiedades electrónicas de la aleación aluminio-fósforo de fase sólida con estructura cristalina tipo ZnS (blenda de cinc), para lo cual se resuelve la ecuación de Schrödinger con el método LMTO. El potencial de interacción en la ecuación de Schrödinger se formulará con la teoría del funcional densidad (DFT) y la aproximación LDA para el potencial de intercambio y correlación.

3.1.3 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Calcular el potencial de interacción electrónica en la aproximación LDA para aluminio y fósforo.



- b) Determinar las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) de la aleación aluminio-fósforo de fase sólida con estructura cristalina tipo ZnS
- c) Calcular la energía total de la aleación aluminio-fósforo de fase sólida con estructura cristalina tipo ZnS.

3.1.4 ALCANCE DE LA INVESTIGACIÓN

La densidad de estados es de gran utilidad para determinar otras propiedades físicas de un material o una aleación, tal como: la conductividad térmica, la conductividad eléctrica, siendo de utilidad académica y de beneficio para la industria que utiliza los materiales semiconductores.

Este proyecto sobre las propiedades electrónicas y la energía total de la aleación aluminio-fósforo es una investigación 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).

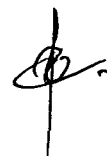
Los resultados de la presente investigación pueden ser contrastados con los resultados de otras investigaciones teórica y experimental publicadas en revistas internacionales de especialidad, tales como: la Physical Review B, Physical Review Letter, entre otras.



3.2 IMPORTANCIA Y JUSTIFICACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

La presente investigación fue motivada por el interés de conocer las propiedades electrónicas de materiales y de aleaciones sólidas con potencial de aplicación tecnológica. La investigación es importante porque los resultados se pueden usar para determinar otras propiedades físicas de la aleación aluminio-fósforo, tales como: el calor específico, la conductividad térmica, la conductividad eléctrica, etc. Es un aporte científico porque amplía el conocimiento de las propiedades físicas de la aleación aluminio-fósforo.

En los países desarrollados existen grupos de investigación y desarrollo de software para estudiar las propiedades electrónicas de materiales, la cual es considerada una herramienta. La presente investigación se justifica porque el desarrollo de herramientas propias en el Perú, no solo nos hace autónomos e independientes, sino que nos da la experiencia que luego podría ser usada en otras áreas de mayor prioridad nacional.



IV MARCO TEÓRICO

4.1.- TEORÍA DEL FUNCIONAL DENSIDAD

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

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

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

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

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

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

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

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

Donde $T[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$ es la energía cinética de las N partículas, definida anteriormente. $U[n]$ es la clásica energía potencial de interacción colombiana y $E_{xc}[n_{\uparrow}, n_{\downarrow}]$ describe la energía de intercambio y correlación entre las partículas. Esta es la energía que considera todos los efectos cuánticos que no se toman en cuenta en la energía clásica de Hartree [10], [11]. La densidad de spin puede escribirse en término de los orbitales orto-normales y el número de ocupación $f_{\alpha\sigma}$ en el intervalo $0 < f_{\alpha\sigma} < 1$, de modo que vale la siguiente ecuación:

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



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

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

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

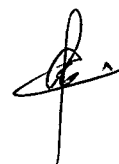
Y todos los efectos cuánticos que no se toman en cuenta en la clásica interacción colombiana se dan a través del potencial de intercambio y correlación que es de la forma:

$$V\sigma_{eff}[n\uparrow, n\downarrow] = \frac{\partial E_{xc}[n\uparrow, n\downarrow]}{\partial n_{\sigma}(\mathbf{r})} \quad (4.1.12)$$

El significado de los $\epsilon_{\alpha\sigma}$ como auto-valores son bien explicados por un argumento de Slater [14] y Janak [12]. Cálculos con la funcional de la densidad de spin (SDF) podrían dar resultados exactos si la $E_{xc}[n\uparrow, n\downarrow]$ fuera conocida y usada en las ecuaciones. A menudo en los cálculos se hace la aproximación de la densidad local de spin (LSDA) [15], [9]

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

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



4.2.- LA ENERGÍA TOTAL DEL SISTEMA

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

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

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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



4.3.- EL POTENCIAL EFECTIVO

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

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

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

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

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

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



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

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

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

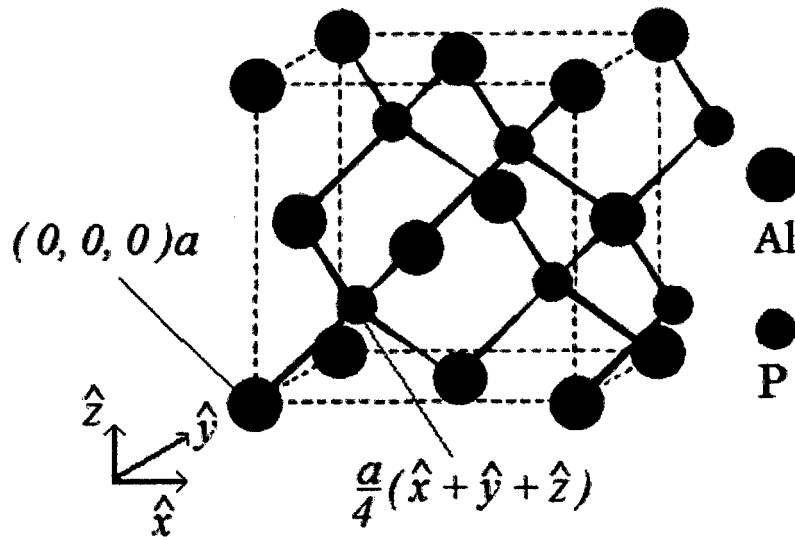
4.4.- EL POTENCIAL DEL SOLIDO CRISTALINO

En el estado fundamental el compuesto binario de aluminio-fosforo (AlP) presenta una fase solida con una estructura cristalina tipo blenda de cinc (ZnS), con una constante de red $a = 5.467\text{\AA}$ según [21]. Esta estructura cristalina abierta, se puede considerar como dos redes de Bravais, desplazadas a lo largo de la línea diagonal del cubo, un cuarto de longitud de la constante de la red cristalina.

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



FIGURA N° 4.1
ESTRUCTURA CRISTALINA DEL AIP



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

Como la red de tipo blenda de cinc, es una estructura abierta, posee regiones a lo largo de la diagonal sin ocupación atómica. El espacio de estas regiones se llena con esferas vacías, a las que se transfiere una pequeña parte de la carga electrónica de valencia que está fuera o más allá del radio de Wigner-Zeits de las esferas atómicas cargadas.

La transferencia se hace mediante el parámetro γ , que varía entre 0 y 1, el que será definido más adelante. De este modo, para el átomo que está centrado en la posición \mathbf{R} , el potencial efectivo $V_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$, que esta descrito por la ecuación (4.3.2),


ya contiene toda la información sobre la estructura de la red cristalina de tipo blenda de cinc y tiene la siguiente forma:

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

En la que se considera un término adicional que representa la interacción entre las esferas vacías de la diagonal cuando poseen una pequeña parte de la carga electrónica de las esferas atómicas y está dada por:

$$V_{M_i} = - \sum_{R'}^4 2q_{R'} \sum_T' \frac{1}{|\bar{R} - \bar{R}' - \bar{T}|}
 \tag{4.4.2}$$

El apostrofe ' en la sumatoria significa que en la doble suma se excluye el término $\mathbf{R} = \mathbf{R}' + \mathbf{T}$. Este término adicional (4.4.2) se conoce como el potencial de Madelung [16], y para determinar su contribución al potencial también se necesita conocer la distribución de la carga electrónica que hay en las esferas vacías de la red cristalina. Como para este caso es válida, la ecuación (4.2.11) y como en las esferas vacías no poseen carga de coraza, para estas se cumple que $n^c_{R_i}(r) = 0$ y además vale la ecuación (4.2.3). Aquí el problema es conocer la densidad de carga electrónica de los electrones de valencia $n^v_{R_i}(r)$, que es completamente diferente en el sólido que para el átomo libre y que se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger (4.2.3) auto-consistentemente.



4.5.- LA CARGA ELECTRÓNICA EN EL SOLIDO

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

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

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

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

$$Z_1 = \bar{Z}_1^{at} + \gamma q_2^{at} \quad Z_2 = \bar{Z}_2^{at} + \gamma q_1^{at}$$

$$Z_3 = Z_4 = \left(\frac{1-\gamma}{2}\right)(q_1^{at} + q_2^{at})$$

$$(0 < \gamma < 1) \quad (4.5.7)$$

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

$$q_1 = q_1^{at} - \gamma q_2^{at} \quad q_2 = q_2^{at} - \gamma q_1^{at}$$

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

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



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

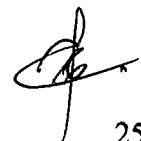
$$n_{R_i,cor}(r) = n_{R_i,cor}^{at}(r) + \frac{3 q_{R_i,cor}^{at}}{4\pi w^2} \quad (4.5.9)$$

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

4.6.- LOS PARÁMETROS POTENCIALES

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

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



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

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

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

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



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

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

Con

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

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

4.7.- LA DENSIDAD DE ESTADOS

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

Con:

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

Es el volumen de la celda elemental de la estructura FCC. En el resto del volumen de la FBZ los valores de $\epsilon_j(\mathbf{k})$ y $C_j(\mathbf{k})$ se repiten de acuerdo a la simetría de la zona. La dirección cristalográfica de alta simetría $\Gamma-X$, $\Gamma-K$ y $L-\Gamma$ que para el AIP corresponde a las direcciones $k(1,0,0)$, $k(1,1,0)$ y $k(1,1,1)$ están contenidas en la IFBZ.



En presente trabajo las bandas electrónicas son calculadas en las direcciones de cristalográficas L - Γ , $\Gamma - X$, $\Gamma - K$, de alta simetría de la estructura cristalina blenda de cinc. La dirección $\Gamma - X$, corresponde a $k(0,1,0)$, para todo k_x entre 0 y $2\pi/a$, corresponde a:

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

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

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

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

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

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

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



Y:

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

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

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

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



V MATERIALES Y METODOS

5.1 MATERIALES

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

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

5.2 MÉTODOS

La metodología para la demostración la hipótesis del presente trabajo consiste:

- 1) Se calcula el potencial efectivo para el sólido cristalino $V(\mathbf{r})$ dado por la ecuación (4.4.1), usando la densidad de carga electrónica para el átomo libre del aluminio y del fosforo.
- 2) Con este potencial y el método LMTO se resuelve la ecuación (4.3.3), lo que permite conocer los parámetros potenciales del solido cristalino.
- 3) Para determinar la estructura electrónica (las bandas de energía y la densidad de estados electrónicos) debemos de resolver la ecuación de



Schrödinger para un electrón en el sólido (fase cristalina), ecuación (4.7.1), usando los parámetros potenciales ya conocidos junto con el método de los orbitales lineales muffin-tin, conocido como método LMTO del Profesor Hans L. Skriver [6], método que existe en la literatura.

- 4) Usando los resultados de la DOS se determina el ancho de la región de energía prohibida del AIP en el estado fundamental. La energía total se calcula usando la ecuación (4.2.12), en la que se usa los resultados de la DOS ya conocida en el paso anterior.

También se requiere conocer la solución ecuaciones diferenciales no lineales por el método de las diferencias finitas, así como de conocer métodos de integración y métodos de diagonalización de matrices, que también existen en la literatura.



VI RESULTADOS

6.1 El potencial efectivo

El trabajo se inicia con el cálculo del potencial efectivo en la aproximación LDA, para las esferas atómicas de fósforo, de aluminio y de las esferas vacías en la red cristalina. Los resultados del cálculo se dan en las siguientes tablas.

Tabla N° 6.1

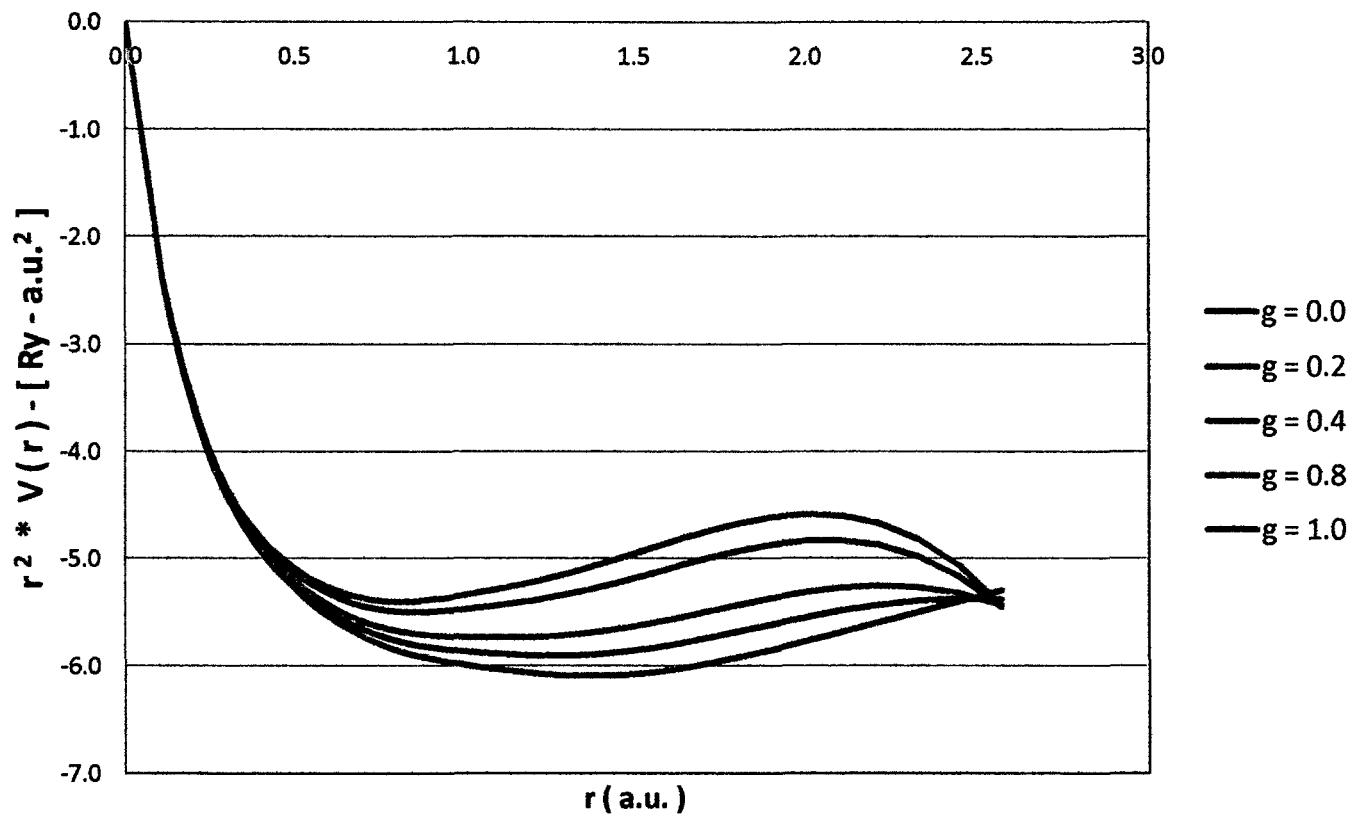
POTENCIAL EFECTIVO LDA - ATOMO DE FOSFORO						
r (a.u.)	$r^2 * V(r) \text{ Ry-(a.u.)}^2$					
	g = 0.0	g = 0.2	g = 0.4	g = 0.6	g = 0.8	g = 1.0
0.0001	-0.0032	-0.0032	-0.0032	-0.0032	-0.0032	-0.0032
0.1048	-2.3535	-2.3518	-2.3501	-2.3484	-2.3467	-2.3450
0.1563	-3.1066	-3.1028	-3.0990	-3.0951	-3.0913	-3.0875
0.1728	-3.3089	-3.3042	-3.2996	-3.2949	-3.2902	-3.2856
0.2110	-3.7221	-3.7151	-3.7082	-3.7013	-3.6943	-3.6874
0.2218	-3.8258	-3.8181	-3.8105	-3.8028	-3.7952	-3.7875
0.2332	-3.9291	-3.9207	-3.9122	-3.9037	-3.8953	-3.8868
0.2452	-4.0317	-4.0223	-4.0130	-4.0037	-3.9943	-3.9850
0.2577	-4.1332	-4.1228	-4.1125	-4.1022	-4.0919	-4.0816
0.2709	-4.2332	-4.2218	-4.2105	-4.1991	-4.1877	-4.1763
0.2848	-4.3316	-4.3190	-4.3064	-4.2939	-4.2813	-4.2687
0.2994	-4.4280	-4.4141	-4.4002	-4.3863	-4.3725	-4.3586
0.3148	-4.5221	-4.5068	-4.4915	-4.4762	-4.4609	-4.4456
0.3309	-4.6140	-4.5971	-4.5802	-4.5633	-4.5464	-4.5295
0.3479	-4.7035	-4.6848	-4.6662	-4.6475	-4.6289	-4.6103
0.3657	-4.7905	-4.7699	-4.7493	-4.7288	-4.7082	-4.6877
0.3845	-4.8751	-4.8524	-4.8297	-4.8071	-4.7844	-4.7617
0.4042	-4.9574	-4.9324	-4.9074	-4.8824	-4.8574	-4.8324
0.4249	-5.0376	-5.0100	-4.9825	-4.9549	-4.9274	-4.8998
0.4467	-5.1157	-5.0854	-5.0550	-5.0246	-4.9942	-4.9639
0.4696	-5.1920	-5.1586	-5.1251	-5.0917	-5.0582	-5.0247
0.4937	-5.2665	-5.2297	-5.1928	-5.1560	-5.1191	-5.0823
0.5190	-5.3393	-5.2987	-5.2582	-5.2176	-5.1771	-5.1365
0.5456	-5.4102	-5.3656	-5.3210	-5.2764	-5.2318	-5.1872
0.5736	-5.4792	-5.4301	-5.3811	-5.3321	-5.2830	-5.2340
0.6030	-5.5458	-5.4919	-5.4381	-5.3842	-5.3303	-5.2765

0.6339	-5.6097	-5.5506	-5.4914	-5.4323	-5.3732	-5.3141
0.6664	-5.6702	-5.6054	-5.5405	-5.4757	-5.4109	-5.3460
0.7006	-5.7267	-5.6557	-5.5847	-5.5137	-5.4427	-5.3717
0.7365	-5.7786	-5.7010	-5.6233	-5.5457	-5.4680	-5.3903
0.7743	-5.8254	-5.7406	-5.6557	-5.5709	-5.4861	-5.4013
0.8140	-5.8667	-5.7743	-5.6818	-5.5893	-5.4969	-5.4044
0.8557	-5.9026	-5.8021	-5.7015	-5.6009	-5.5002	-5.3996
0.8996	-5.9339	-5.8247	-5.7155	-5.6063	-5.4970	-5.3877
0.9457	-5.9614	-5.8431	-5.7248	-5.6064	-5.4880	-5.3695
0.9942	-5.9865	-5.8587	-5.7308	-5.6027	-5.4745	-5.3463
1.0451	-6.0102	-5.8722	-5.7341	-5.5959	-5.4574	-5.3188
1.0987	-6.0331	-5.8844	-5.7356	-5.5865	-5.4371	-5.2876
1.1551	-6.0544	-5.8946	-5.7344	-5.5739	-5.4131	-5.2520
1.2143	-6.0731	-5.9015	-5.7295	-5.5571	-5.3843	-5.2111
1.2765	-6.0870	-5.9033	-5.7191	-5.5343	-5.3491	-5.1635
1.3420	-6.0940	-5.8981	-5.7015	-5.5043	-5.3065	-5.1082
1.4108	-6.0921	-5.8842	-5.6754	-5.4659	-5.2556	-5.0447
1.4831	-6.0797	-5.8604	-5.6401	-5.4188	-5.1966	-4.9736
1.5592	-6.0560	-5.8266	-5.5958	-5.3639	-5.1308	-4.8966
1.6391	-6.0204	-5.7829	-5.5436	-5.3028	-5.0605	-4.8169
1.7231	-5.9733	-5.7306	-5.4856	-5.2386	-4.9897	-4.7392
1.8115	-5.9151	-5.6714	-5.4247	-5.1754	-4.9236	-4.6697
1.9044	-5.8469	-5.6082	-5.3654	-5.1189	-4.8693	-4.6168
2.0020	-5.7699	-5.5440	-5.3125	-5.0761	-4.8354	-4.5909
2.1046	-5.6855	-5.4832	-5.2729	-5.0559	-4.8330	-4.6051
2.2126	-5.5948	-5.4302	-5.2542	-5.0687	-4.8753	-4.6751
2.3260	-5.4993	-5.3911	-5.2661	-5.1278	-4.9786	-4.8202
2.4453	-5.3998	-5.3722	-5.3199	-5.2487	-5.1625	-5.0639
2.5706	-5.2970	-5.3815	-5.4293	-5.4501	-5.4503	-5.4339

Fuente: Resultados de la presente investigación.



Potencial Efectivo LDA, Atomos de Fosforo



GRAFICA N° 6.1.- Fuente Resultados de la presente investigación.

Los resultados del cálculo del potencial efectivo en la aproximación LDA, para las esferas atómicas de aluminio se dan a continuación en la tabla N° 6.2

Tabla N° 6.2

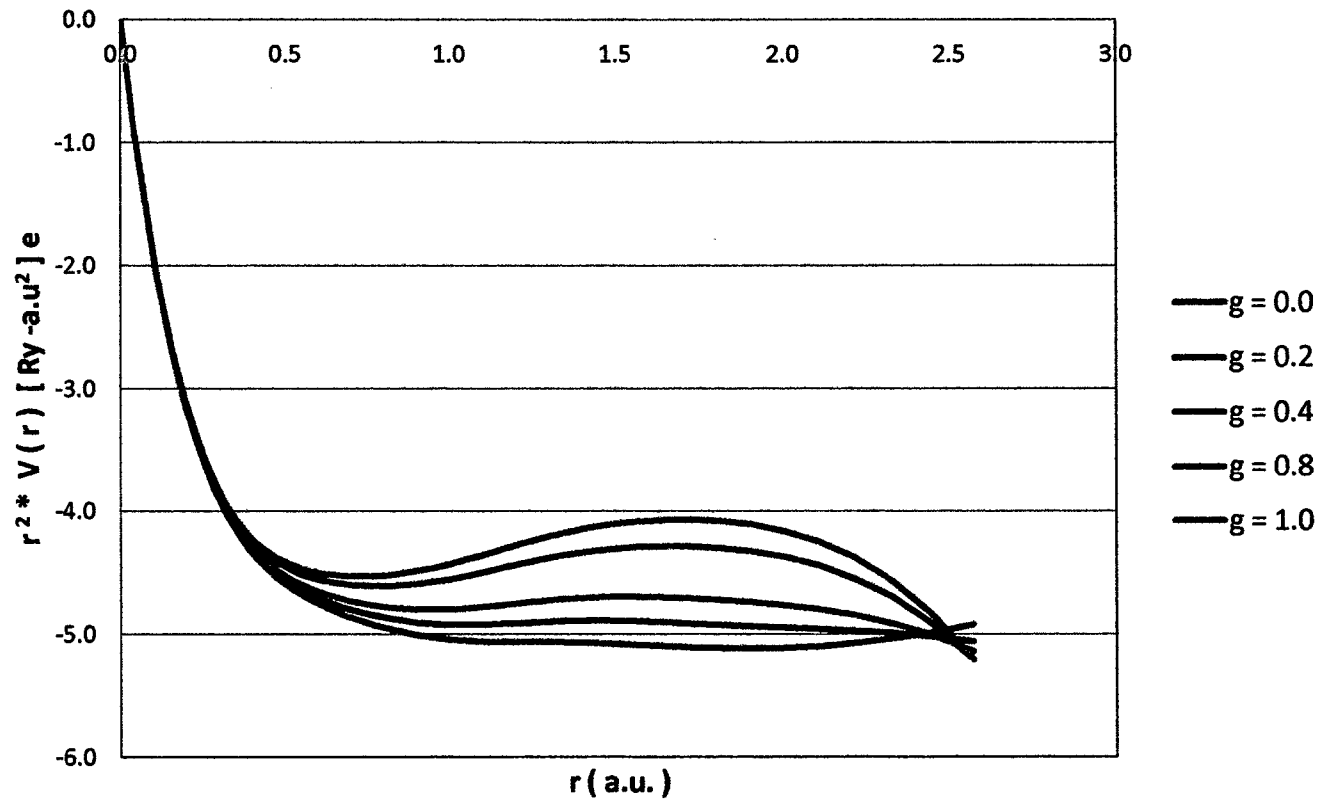
POTENCIAL EFECTIVO LDA - ATOMOS DE ALUMINIO						
r (a.u.)	$r^2 * V(r) \text{ Ry-(a.u)}^2$					
	g = 0.0	g = 0.2	g = 0.4	g = 0.6	g = 0.8	g = 1.0
0.0001	-0.0027	-0.0027	-0.0027	-0.0027	-0.0027	-0.0027
0.0405	-0.9428	-0.9425	-0.9423	-0.9421	-0.9418	-0.9416
0.1048	-2.0675	-2.0658	-2.0642	-2.0626	-2.0610	-2.0594
0.1563	-2.7390	-2.7354	-2.7318	-2.7282	-2.7247	-2.7211
0.1816	-3.0109	-3.0060	-3.0012	-2.9964	-2.9915	-2.9867
0.1909	-3.1028	-3.0975	-3.0921	-3.0868	-3.0815	-3.0761
0.2332	-3.4723	-3.4644	-3.4564	-3.4485	-3.4406	-3.4326
0.2709	-3.7440	-3.7333	-3.7226	-3.7120	-3.7013	-3.6906
0.2848	-3.8317	-3.8199	-3.8081	-3.7963	-3.7845	-3.7727
0.2994	-3.9172	-3.9042	-3.8912	-3.8782	-3.8652	-3.8522
0.3148	-4.0003	-3.9859	-3.9715	-3.9572	-3.9428	-3.9284
0.3309	-4.0803	-4.0645	-4.0486	-4.0328	-4.0169	-4.0011
0.3479	-4.1572	-4.1397	-4.1222	-4.1047	-4.0872	-4.0697
0.3657	-4.2304	-4.2111	-4.1918	-4.1725	-4.1532	-4.1339
0.3845	-4.2999	-4.2786	-4.2573	-4.2360	-4.2147	-4.1934
0.4042	-4.3654	-4.3419	-4.3184	-4.2950	-4.2715	-4.2480
0.4249	-4.4270	-4.4011	-4.3752	-4.3493	-4.3235	-4.2976
0.4467	-4.4846	-4.4561	-4.4276	-4.3991	-4.3705	-4.3420
0.4696	-4.5385	-4.5071	-4.4757	-4.4443	-4.4128	-4.3814
0.4937	-4.5888	-4.5542	-4.5196	-4.4850	-4.4504	-4.4158
0.5190	-4.6359	-4.5978	-4.5597	-4.5216	-4.4835	-4.4454
0.5456	-4.6799	-4.6380	-4.5961	-4.5542	-4.5122	-4.4703
0.5736	-4.7214	-4.6753	-4.6292	-4.5831	-4.5370	-4.4909
0.6030	-4.7606	-4.7099	-4.6592	-4.6086	-4.5579	-4.5072
0.6339	-4.7978	-4.7422	-4.6865	-4.6309	-4.5752	-4.5196
0.6664	-4.8333	-4.7722	-4.7111	-4.6501	-4.5890	-4.5280
0.7006	-4.8671	-4.8002	-4.7333	-4.6663	-4.5994	-4.5324
0.7365	-4.8994	-4.8261	-4.7528	-4.6795	-4.6061	-4.5328
0.7743	-4.9299	-4.8497	-4.7695	-4.6894	-4.6092	-4.5290

0.8140	-4.9583	-4.8708	-4.7832	-4.6957	-4.6081	-4.5206
0.8557	-4.9843	-4.8889	-4.7935	-4.6980	-4.6026	-4.5071
0.8996	-5.0073	-4.9036	-4.7998	-4.6960	-4.5922	-4.4884
0.9457	-5.0268	-4.9143	-4.8017	-4.6891	-4.5765	-4.4638
0.9942	-5.0423	-4.9207	-4.7990	-4.6772	-4.5554	-4.4335
1.0451	-5.0536	-4.9226	-4.7915	-4.6603	-4.5290	-4.3975
1.0987	-5.0608	-4.9203	-4.7797	-4.6389	-4.4979	-4.3568
1.1551	-5.0642	-4.9145	-4.7644	-4.6140	-4.4633	-4.3123
1.2143	-5.0653	-4.9065	-4.7472	-4.5874	-4.4271	-4.2663
1.2765	-5.0653	-4.8980	-4.7299	-4.5609	-4.3912	-4.2208
1.3420	-5.0663	-4.8912	-4.7147	-4.5370	-4.3582	-4.1784
1.4108	-5.0695	-4.8874	-4.7033	-4.5174	-4.3299	-4.1410
1.4831	-5.0760	-4.8879	-4.6969	-4.5035	-4.3079	-4.1104
1.5592	-5.0853	-4.8925	-4.6959	-4.4959	-4.2931	-4.0878
1.6391	-5.0964	-4.9007	-4.6999	-4.4949	-4.2863	-4.0744
1.7231	-5.1069	-4.9110	-4.7085	-4.5007	-4.2882	-4.0718
1.8115	-5.1146	-4.9222	-4.7215	-4.5140	-4.3009	-4.0829
1.9044	-5.1170	-4.9334	-4.7393	-4.5367	-4.3272	-4.1117
2.0020	-5.1119	-4.9444	-4.7635	-4.5720	-4.3719	-4.1647
2.1046	-5.0975	-4.9558	-4.7969	-4.6247	-4.4419	-4.2504
2.2126	-5.0722	-4.9692	-4.8439	-4.7018	-4.5466	-4.3806
2.3260	-5.0352	-4.9876	-4.9109	-4.8127	-4.6981	-4.5703
2.4453	-4.9855	-5.0151	-5.0060	-4.9694	-4.9122	-4.8388
2.5706	-4.9226	-5.0572	-5.1400	-5.1872	-5.2084	-5.2096

Fuente: Resultados de la presente investigación.



Potencial Efectivo LDA, Atomos de Aluminio



GRAFICA N° 6.2.- Fuente: Resultados de la presente investigación.

Los resultados del cálculo del potencial efectivo en la aproximación LDA, para las esferas atómicas vacías se dan a continuación en la tabla N° 6.3

Tabla N° 6.3

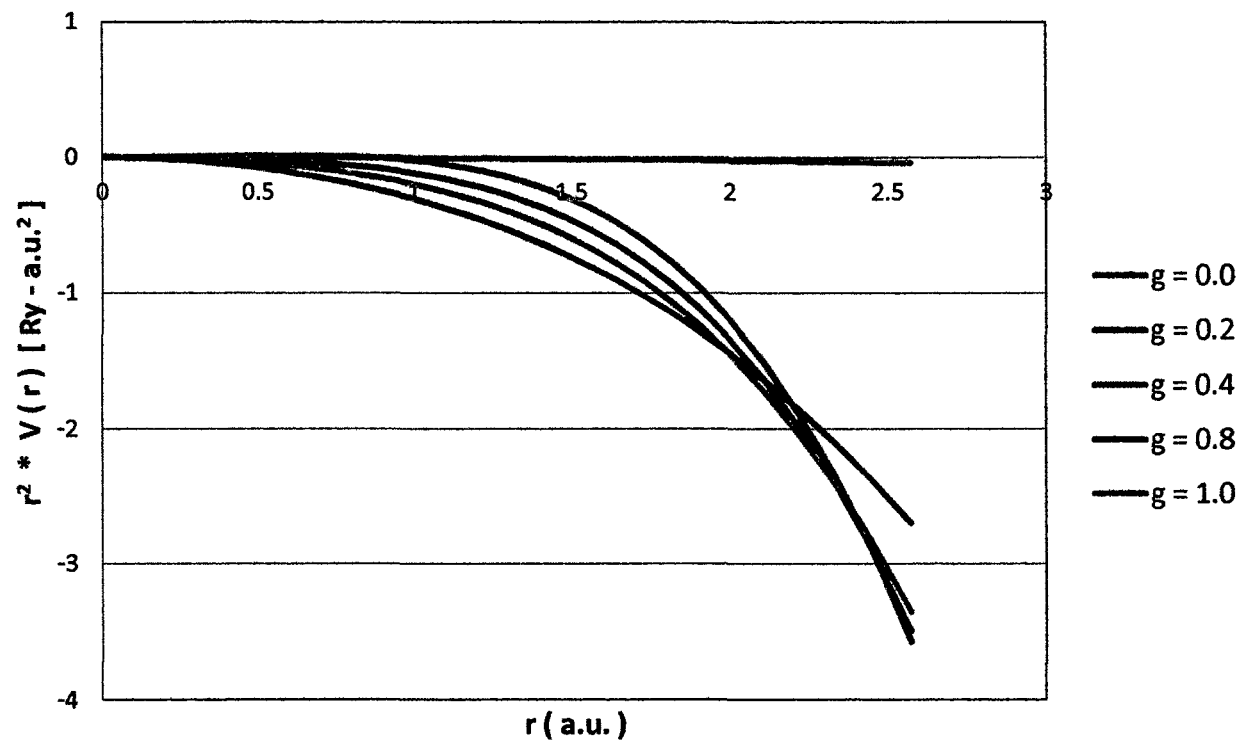
POTENCIAL EFECTIVO LDA - ESFERAS VACIAS						
r (a.u.)	$r^2 * V(r) \text{ Ry-(a.u)}^2$					
	g = 0.0	g = 0.2	g = 0.4	g = 0.6	g = 0.8	g = 1.0
0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0520	0.0002	-0.0001	-0.0004	-0.0006	-0.0008	0.0000
0.0702	0.0003	-0.0002	-0.0007	-0.0011	-0.0014	0.0000
0.0902	0.0006	-0.0003	-0.0011	-0.0019	-0.0023	0.0000
0.1048	0.0008	-0.0004	-0.0016	-0.0025	-0.0031	-0.0001
0.1102	0.0008	-0.0005	-0.0017	-0.0028	-0.0035	-0.0001
0.1158	0.0009	-0.0005	-0.0019	-0.0031	-0.0038	-0.0001
0.1217	0.0010	-0.0006	-0.0021	-0.0034	-0.0043	-0.0001
0.1280	0.0011	-0.0007	-0.0023	-0.0037	-0.0047	-0.0001
0.1345	0.0012	-0.0007	-0.0026	-0.0041	-0.0052	-0.0001
0.1414	0.0014	-0.0008	-0.0028	-0.0046	-0.0057	-0.0001
0.1487	0.0015	-0.0009	-0.0031	-0.0051	-0.0063	-0.0001
0.1563	0.0017	-0.0010	-0.0035	-0.0056	-0.0070	-0.0001
0.1643	0.0018	-0.0011	-0.0038	-0.0062	-0.0078	-0.0002
0.1728	0.0020	-0.0012	-0.0042	-0.0068	-0.0086	-0.0002
0.1816	0.0022	-0.0014	-0.0047	-0.0076	-0.0095	-0.0002
0.1909	0.0024	-0.0015	-0.0052	-0.0084	-0.0105	-0.0002
0.2007	0.0027	-0.0017	-0.0058	-0.0093	-0.0116	-0.0002
0.2110	0.0030	-0.0019	-0.0064	-0.0102	-0.0128	-0.0003
0.2218	0.0032	-0.0021	-0.0071	-0.0113	-0.0142	-0.0003
0.2332	0.0036	-0.0024	-0.0078	-0.0125	-0.0156	-0.0003
0.2452	0.0039	-0.0026	-0.0087	-0.0139	-0.0173	-0.0004
0.2577	0.0043	-0.0029	-0.0096	-0.0153	-0.0191	-0.0004
0.2709	0.0047	-0.0033	-0.0106	-0.0170	-0.0211	-0.0004
0.2848	0.0051	-0.0037	-0.0118	-0.0188	-0.0234	-0.0005
0.2994	0.0056	-0.0041	-0.0131	-0.0208	-0.0259	-0.0005
0.3148	0.0061	-0.0046	-0.0145	-0.0230	-0.0286	-0.0006
0.3309	0.0066	-0.0052	-0.0161	-0.0254	-0.0316	-0.0006

0.3479	0.0072	-0.0058	-0.0178	-0.0282	-0.0350	-0.0007
0.3845	0.0084	-0.0074	-0.0220	-0.0346	-0.0428	-0.0009
0.4042	0.0090	-0.0084	-0.0245	-0.0383	-0.0473	-0.0010
0.4696	0.0110	-0.0123	-0.0337	-0.0522	-0.0641	-0.0013
0.4937	0.0117	-0.0140	-0.0376	-0.0578	-0.0710	-0.0014
0.5190	0.0123	-0.0159	-0.0419	-0.0642	-0.0786	-0.0016
0.5456	0.0128	-0.0182	-0.0468	-0.0713	-0.0870	-0.0018
0.5736	0.0132	-0.0209	-0.0523	-0.0791	-0.0963	-0.0020
0.6339	0.0134	-0.0277	-0.0655	-0.0977	-0.1182	-0.0024
0.6664	0.0130	-0.0320	-0.0734	-0.1087	-0.1310	-0.0026
0.7006	0.0123	-0.0371	-0.0824	-0.1210	-0.1452	-0.0029
0.7365	0.0110	-0.0431	-0.0926	-0.1347	-0.1609	-0.0032
0.8140	0.0061	-0.0585	-0.1176	-0.1675	-0.1980	-0.0039
0.8557	0.0020	-0.0684	-0.1328	-0.1870	-0.2198	-0.0043
0.8996	-0.0036	-0.0802	-0.1502	-0.2090	-0.2441	-0.0048
0.9457	-0.0110	-0.0943	-0.1702	-0.2338	-0.2712	-0.0053
0.9942	-0.0208	-0.1111	-0.1933	-0.2618	-0.3014	-0.0059
1.0451	-0.0334	-0.1312	-0.2199	-0.2936	-0.3352	-0.0065
1.0987	-0.0498	-0.1553	-0.2507	-0.3296	-0.3730	-0.0072
1.1551	-0.0707	-0.1841	-0.2865	-0.3705	-0.4154	-0.0079
1.2143	-0.0973	-0.2188	-0.3281	-0.4171	-0.4629	-0.0087
1.2765	-0.1309	-0.2605	-0.3766	-0.4703	-0.5163	-0.0097
1.3420	-0.1732	-0.3107	-0.4334	-0.5312	-0.5763	-0.0107
1.4108	-0.2263	-0.3713	-0.4999	-0.6010	-0.6438	-0.0118
1.4831	-0.2927	-0.4445	-0.5780	-0.6813	-0.7201	-0.0130
1.5592	-0.3755	-0.5328	-0.6700	-0.7737	-0.8062	-0.0144
1.6391	-0.4785	-0.6397	-0.7786	-0.8805	-0.9037	-0.0159
1.7231	-0.6065	-0.7691	-0.9071	-1.0042	-1.0143	-0.0176
1.8115	-0.7651	-0.9258	-1.0594	-1.1477	-1.1399	-0.0195
1.9044	-0.9613	-1.1158	-1.2402	-1.3147	-1.2829	-0.0215
2.0020	-1.2038	-1.3463	-1.4556	-1.5096	-1.4462	-0.0238
2.1046	-1.5031	-1.6260	-1.7123	-1.7375	-1.6328	-0.0263
2.2126	-1.8723	-1.9659	-2.0190	-2.0046	-1.8467	-0.0290
2.3260	-2.3268	-2.3787	-2.3859	-2.3185	-2.0925	-0.0321
2.4453	-2.8864	-2.8808	-2.8257	-2.6882	-2.3755	-0.0355
2.5706	-3.5742	-3.4912	-3.3535	-3.1247	-2.7022	-0.0392

Fuente: Resultados de la presente investigación.



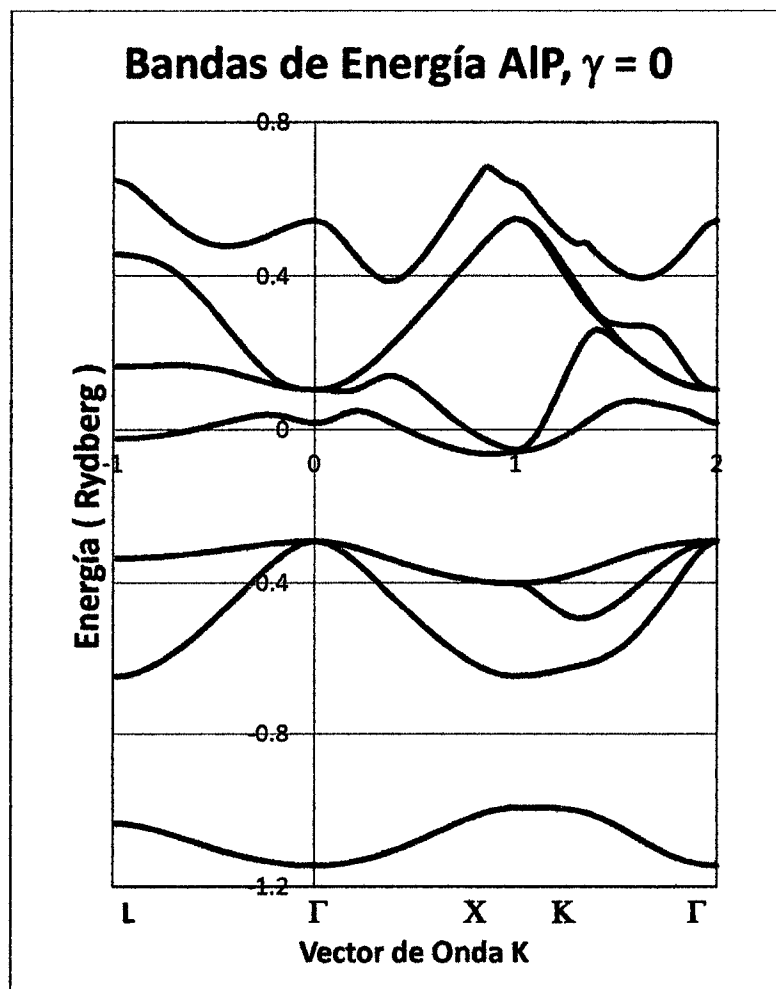
Potencial Efectivo LDA, Esferas vacías



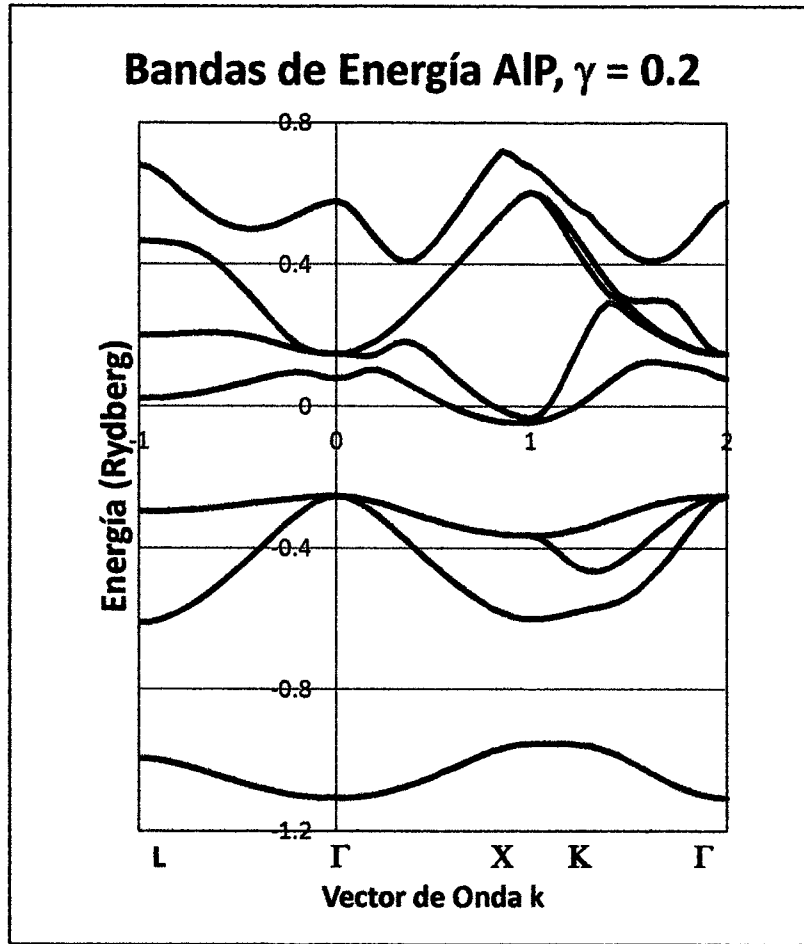
GRAFICA N° 6.3.- Fuente: Resultados de la presente investigación.

6.2 La Estructura de las Bandas de Energía

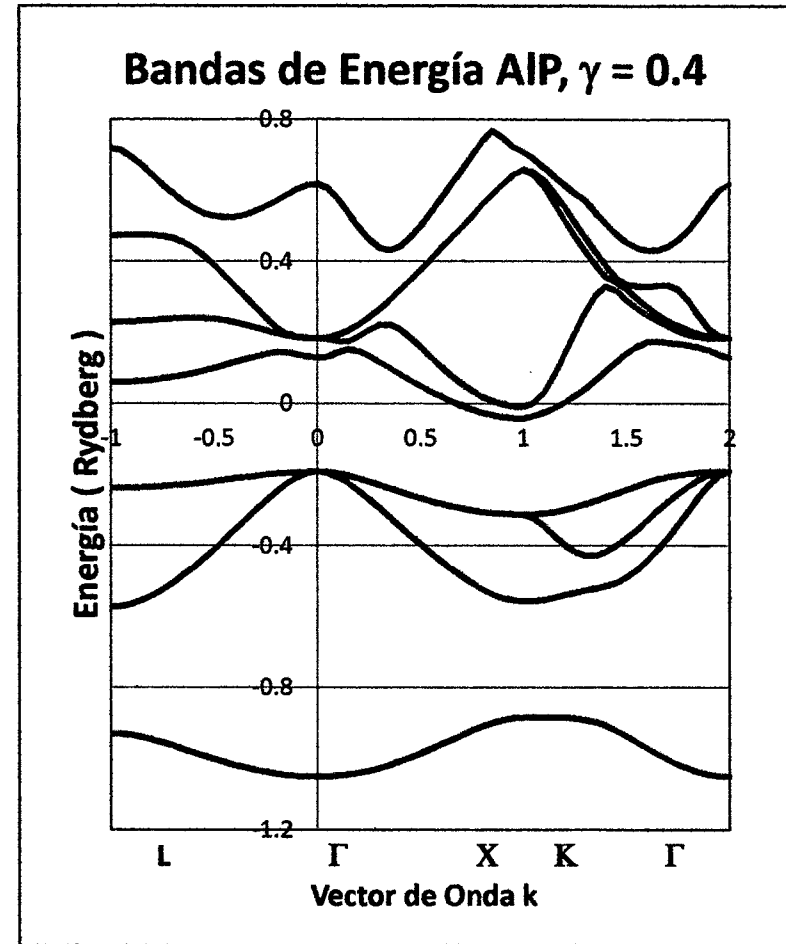
El potencial efectivo se calcula los parámetros potenciales, que con el método LMTO permite resolver la ecuación de Kohn-Sham para el electrón en el sólido cristalino, de la que se obtienen las diferentes bandas de energía del sistema. Las bandas de energía se calculan para las direcciones cristalográficas de alta simetría: $\Gamma - L$, $\Gamma - X$, y $\Gamma - K$, para algunos valores del parámetro (γ).



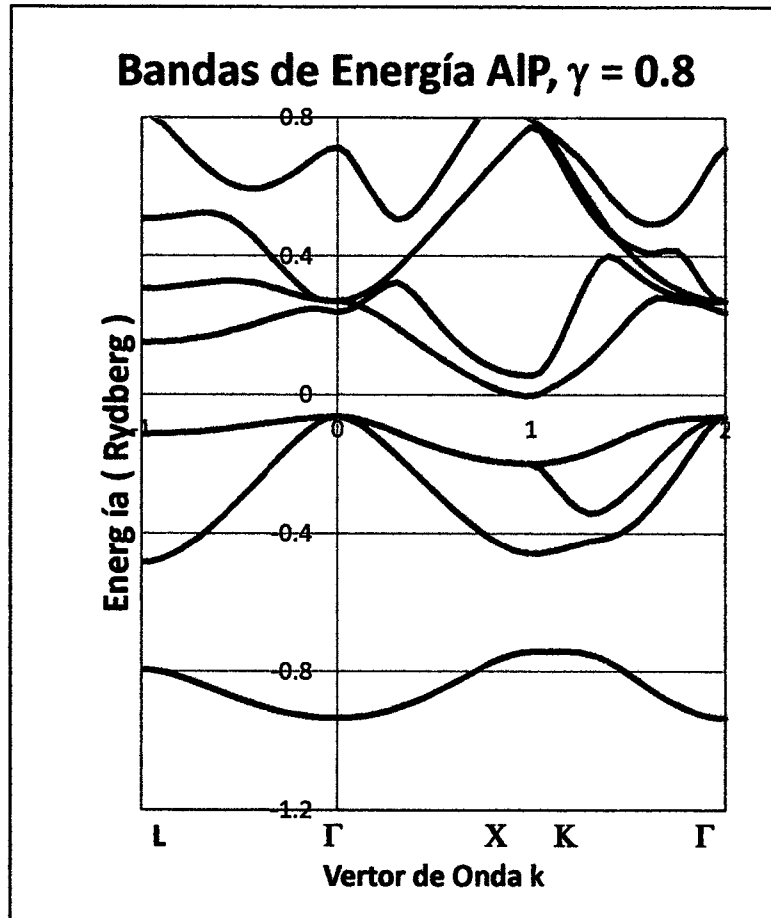
GRÁFICA N° 6.4.- Resultados de la presente investigación



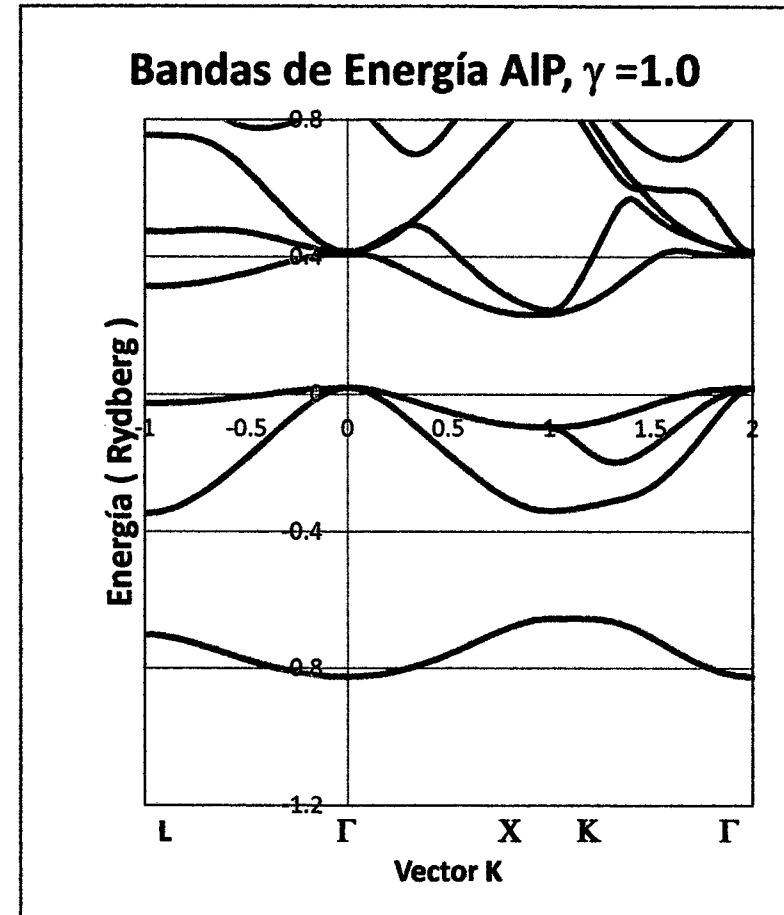
GRÁFICA N° 6.5.- Resultados de la presente investigación.



GRÁFICA N° 6.6.- Resultados de la presente investigación.



GRÁFICA N° 6.7.- Resultados de la presente investigación.



GRÁFICA N° 6.8.- Resultados de la presente investigación.

En la Tabla N° 6.4, se muestran los resultados de las bandas de energía calculados con un valor de $\gamma = 0.0$, en la dirección cristalográfica de alta simetría $L - \Gamma$, lo que corresponde a un vector de onda $k(111)$

TABLA N° 6.4

Bandas de Energía del AIP, para $\gamma = 0.0$ (dirección cristalográfica $L - \Gamma$)									
Energía (Rydberg)									
k (111)	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7	n = 8	n = 9
0	-1.144	-0.291	-0.291	-0.291	0.019	0.106	0.106	0.106	0.546
-0.05	-1.144	-0.295	-0.291	-0.291	0.021	0.106	0.106	0.107	0.544
-0.1	-1.142	-0.306	-0.292	-0.292	0.028	0.109	0.109	0.110	0.536
-0.15	-1.140	-0.323	-0.294	-0.294	0.035	0.114	0.114	0.119	0.526
-0.2	-1.136	-0.343	-0.296	-0.296	0.039	0.119	0.119	0.134	0.514
-0.25	-1.132	-0.367	-0.299	-0.299	0.040	0.126	0.126	0.156	0.503
-0.3	-1.127	-0.392	-0.302	-0.302	0.037	0.134	0.134	0.183	0.493
-0.35	-1.121	-0.418	-0.305	-0.305	0.033	0.141	0.141	0.213	0.485
-0.4	-1.114	-0.445	-0.309	-0.309	0.027	0.149	0.149	0.244	0.481
-0.45	-1.106	-0.471	-0.313	-0.313	0.021	0.155	0.155	0.276	0.480
-0.5	-1.099	-0.496	-0.316	-0.316	0.014	0.161	0.161	0.308	0.483
-0.55	-1.090	-0.521	-0.319	-0.319	0.008	0.165	0.165	0.339	0.491
-0.6	-1.082	-0.544	-0.323	-0.323	0.002	0.168	0.168	0.367	0.503
-0.65	-1.073	-0.566	-0.325	-0.325	-0.004	0.169	0.169	0.392	0.519
-0.7	-1.065	-0.586	-0.328	-0.328	-0.008	0.169	0.169	0.414	0.538
-0.75	-1.057	-0.604	-0.330	-0.330	-0.013	0.169	0.169	0.430	0.560
-0.8	-1.049	-0.619	-0.332	-0.332	-0.016	0.168	0.168	0.442	0.583
-0.85	-1.043	-0.631	-0.334	-0.334	-0.019	0.168	0.168	0.450	0.607
-0.9	-1.039	-0.641	-0.335	-0.335	-0.021	0.167	0.167	0.455	0.629
-0.95	-1.036	-0.646	-0.335	-0.335	-0.022	0.166	0.166	0.457	0.645
-1	-1.035	-0.648	-0.335	-0.335	-0.023	0.166	0.166	0.458	0.651

Fuente: Resultados de la presente investigación.



En la Tabla N° 6.5, se muestran los resultados de las bandas de energía calculados con un valor de $\gamma = 0.0$, en la dirección cristalográfica de alta simetría L – X, lo que corresponde a un vector de onda k (010)

TABLA N° 6.5

Bandas de Energía del AIP, para $\gamma = 0.0$ (dirección cristalográfica $\Gamma - X$)									
Energía (Rydberg)									
k (010)	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7	n = 8	n = 9
0	-1.144	-0.291	-0.291	-0.291	0.019	0.106	0.106	0.106	0.546
0.05	-1.143	-0.295	-0.292	-0.292	0.022	0.105	0.108	0.108	0.538
0.1	-1.141	-0.306	-0.295	-0.295	0.032	0.102	0.115	0.115	0.516
0.15	-1.138	-0.323	-0.300	-0.300	0.043	0.101	0.126	0.126	0.486
0.2	-1.134	-0.343	-0.307	-0.307	0.050	0.105	0.142	0.142	0.455
0.25	-1.128	-0.367	-0.315	-0.315	0.048	0.117	0.160	0.160	0.426
0.3	-1.121	-0.391	-0.323	-0.323	0.039	0.131	0.182	0.182	0.402
0.35	-1.113	-0.417	-0.332	-0.332	0.028	0.140	0.205	0.205	0.389
0.4	-1.104	-0.442	-0.341	-0.341	0.015	0.140	0.231	0.231	0.389
0.45	-1.094	-0.468	-0.350	-0.350	0.002	0.130	0.258	0.258	0.403
0.5	-1.083	-0.493	-0.358	-0.358	-0.010	0.113	0.286	0.286	0.428
0.55	-1.072	-0.517	-0.366	-0.366	-0.022	0.092	0.316	0.316	0.460
0.6	-1.060	-0.540	-0.373	-0.373	-0.033	0.069	0.345	0.345	0.496
0.65	-1.048	-0.561	-0.379	-0.379	-0.042	0.047	0.375	0.375	0.534
0.7	-1.036	-0.581	-0.385	-0.385	-0.050	0.026	0.405	0.405	0.573
0.75	-1.025	-0.600	-0.390	-0.390	-0.056	0.007	0.435	0.435	0.613
0.8	-1.015	-0.615	-0.394	-0.394	-0.061	-0.011	0.464	0.464	0.650
0.85	-1.006	-0.628	-0.397	-0.397	-0.063	-0.025	0.493	0.493	0.684
0.9	-0.999	-0.638	-0.399	-0.399	-0.063	-0.038	0.520	0.520	0.672
0.95	-0.995	-0.644	-0.400	-0.400	-0.061	-0.047	0.542	0.542	0.651
1	-0.994	-0.646	-0.401	-0.401	-0.058	-0.052	0.551	0.551	0.642

Fuente: Resultados de la presente investigación.



En la Tabla N° 6.6, se muestran los resultados de las bandas de energía calculados con un valor de $\gamma = 0.0$, en la dirección cristalográfica de alta simetría $\Gamma - K$, lo que corresponde a un vector de onda k (110)

TABLA N° 6.6

Bandas de Energía del AIP, para $\gamma = 0.0$ (dirección cristalográfica $\Gamma - K$)									
Energía (Rydberg)									
k (110)	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7	n = 8	n = 9
1	-0.994	-0.646	-0.401	-0.401	-0.058	-0.052	0.551	0.551	0.642
1.05	-0.993	-0.646	-0.408	-0.400	-0.054	-0.043	0.543	0.544	0.621
1.1	-0.993	-0.643	-0.425	-0.398	-0.048	-0.013	0.518	0.524	0.586
1.15	-0.993	-0.638	-0.447	-0.394	-0.039	0.033	0.482	0.494	0.554
1.2	-0.994	-0.633	-0.468	-0.389	-0.027	0.087	0.440	0.458	0.526
1.25	-0.996	-0.627	-0.484	-0.383	-0.013	0.145	0.399	0.419	0.502
1.3	-1.000	-0.621	-0.493	-0.375	0.004	0.200	0.360	0.379	0.486
1.35	-1.006	-0.615	-0.493	-0.367	0.022	0.243	0.326	0.341	0.487
1.4	-1.015	-0.607	-0.485	-0.357	0.040	0.262	0.298	0.305	0.461
1.45	-1.027	-0.596	-0.471	-0.348	0.056	0.252	0.271	0.284	0.437
1.5	-1.040	-0.580	-0.453	-0.338	0.068	0.232	0.241	0.277	0.417
1.55	-1.055	-0.559	-0.432	-0.329	0.075	0.211	0.215	0.273	0.403
1.6	-1.071	-0.533	-0.410	-0.320	0.076	0.191	0.191	0.272	0.397
1.65	-1.086	-0.504	-0.387	-0.312	0.073	0.171	0.173	0.271	0.398
1.7	-1.100	-0.470	-0.365	-0.306	0.068	0.153	0.156	0.261	0.406
1.75	-1.113	-0.434	-0.344	-0.301	0.062	0.139	0.141	0.237	0.423
1.8	-1.123	-0.396	-0.326	-0.297	0.056	0.127	0.129	0.201	0.447
1.85	-1.132	-0.359	-0.311	-0.294	0.049	0.117	0.119	0.161	0.476
1.9	-1.139	-0.325	-0.300	-0.292	0.039	0.111	0.111	0.128	0.507
1.95	-1.143	-0.300	-0.293	-0.291	0.025	0.107	0.107	0.111	0.535
2	-1.144	-0.291	-0.291	-0.291	0.019	0.106	0.106	0.106	0.546

Fuente: Resultados de la presente investigación.



6.3 La densidad de estados

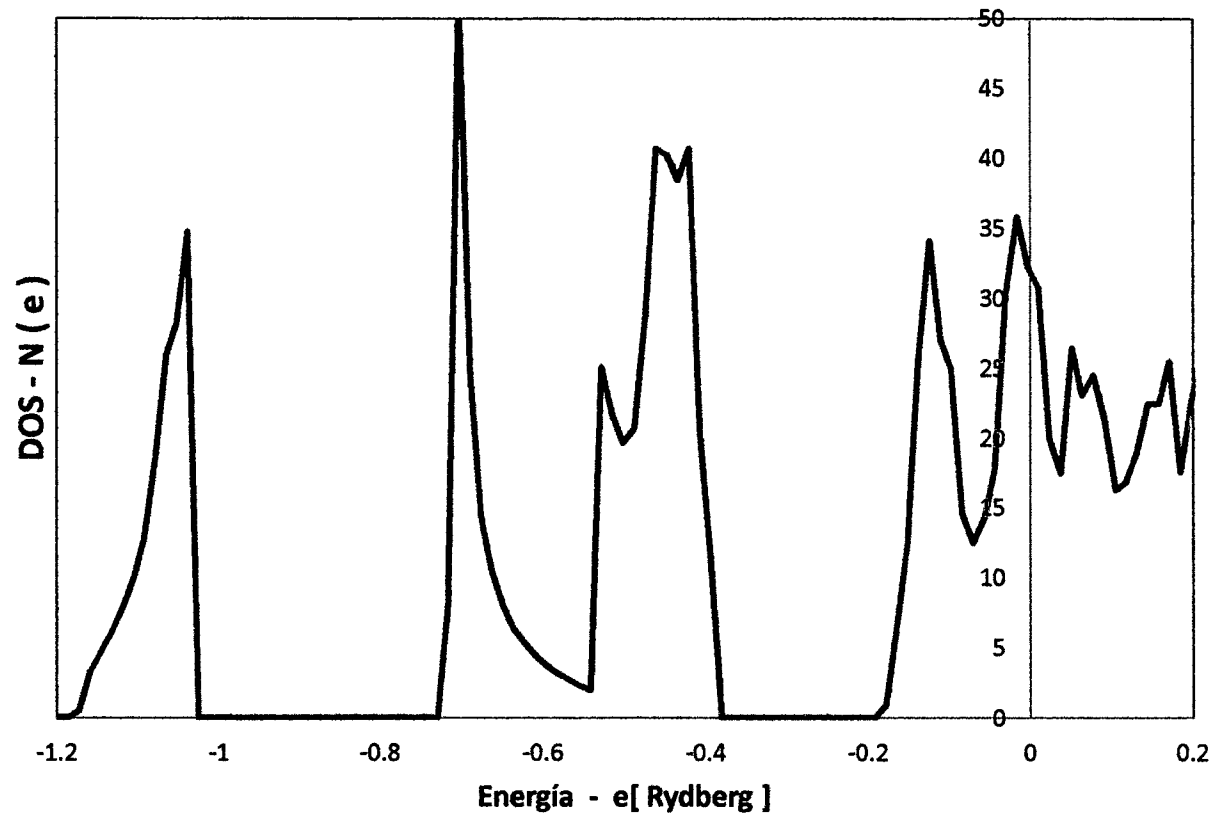
Conocidos los parámetros potenciales de la base LMTO, también se pueden calcular la densidad de estados $N(\epsilon)$ en función de la energía. Los resultados para el parámetro $\gamma = 0.0$, se muestran a continuación.

TABLA N° 6.7

Densidad de Estados $N(\epsilon)$ del AIP obtenidos para $\gamma = 0.0$							
La energía ϵ en unidades Rydberg							
ϵ	$N(\epsilon)$	ϵ	$N(\epsilon)$	ϵ	$N(\epsilon)$	ϵ	$N(\epsilon)$
-1.200	0.000	-0.810	0.000	-0.487	20.721	-0.124	34.086
-1.173	0.499	-0.797	0.000	-0.474	28.686	-0.111	26.994
-1.160	3.293	-0.770	0.000	-0.461	40.739	-0.097	24.961
-1.146	4.678	-0.756	0.000	-0.447	40.241	-0.084	14.565
-1.133	6.190	-0.729	0.000	-0.434	38.449	-0.071	12.456
-1.119	7.889	-0.716	8.047	-0.420	40.712	-0.057	14.260
-1.106	9.925	-0.703	51.701	-0.407	20.457	-0.044	17.743
-1.092	12.866	-0.689	24.673	-0.393	11.017	-0.030	30.310
-1.079	18.491	-0.676	14.312	-0.380	0.000	-0.017	35.807
-1.066	25.965	-0.662	10.516	-0.353	0.000	-0.003	32.200
-1.052	28.282	-0.649	8.029	-0.339	0.000	0.010	30.765
-1.039	34.722	-0.635	6.345	-0.313	0.000	0.024	19.987
-1.025	0.000	-0.622	5.336	-0.299	0.000	0.037	17.475
-0.998	0.000	-0.608	4.474	-0.272	0.000	0.050	26.412
-0.971	0.000	-0.595	3.750	-0.259	0.000	0.064	23.051
-0.958	0.000	-0.582	3.161	-0.232	0.000	0.077	24.505
-0.931	0.000	-0.568	2.732	-0.218	0.000	0.091	21.329
-0.918	0.000	-0.555	2.343	-0.192	0.000	0.104	16.232
-0.891	0.000	-0.541	1.991	-0.178	0.922	0.118	16.824
-0.877	0.000	-0.528	25.076	-0.165	6.452	0.131	18.915
-0.850	0.000	-0.514	21.706	-0.151	12.425	0.145	22.468
-0.837	0.000	-0.501	19.656	-0.138	25.660	0.158	22.481

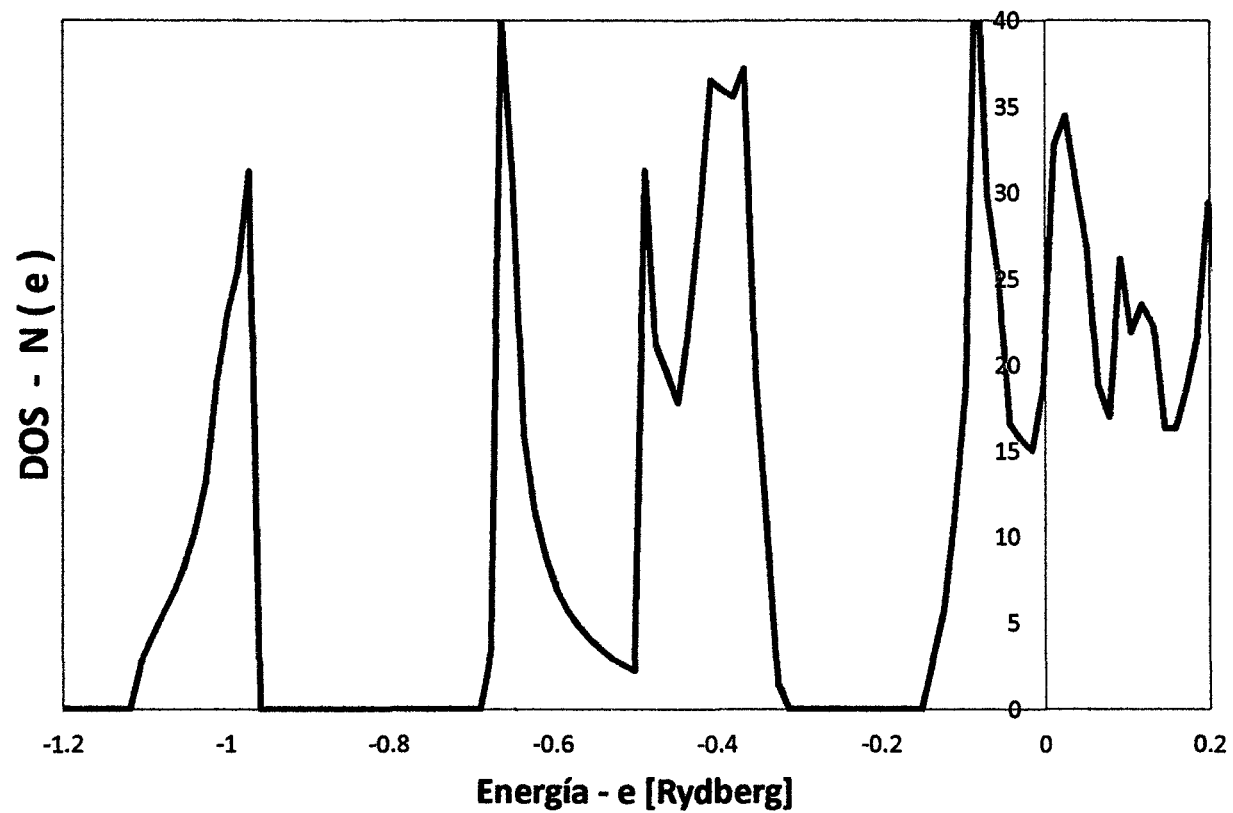
Fuente: Resultados de la presente investigación.

Densidad de Estados del AIP, $\gamma = 0.0$



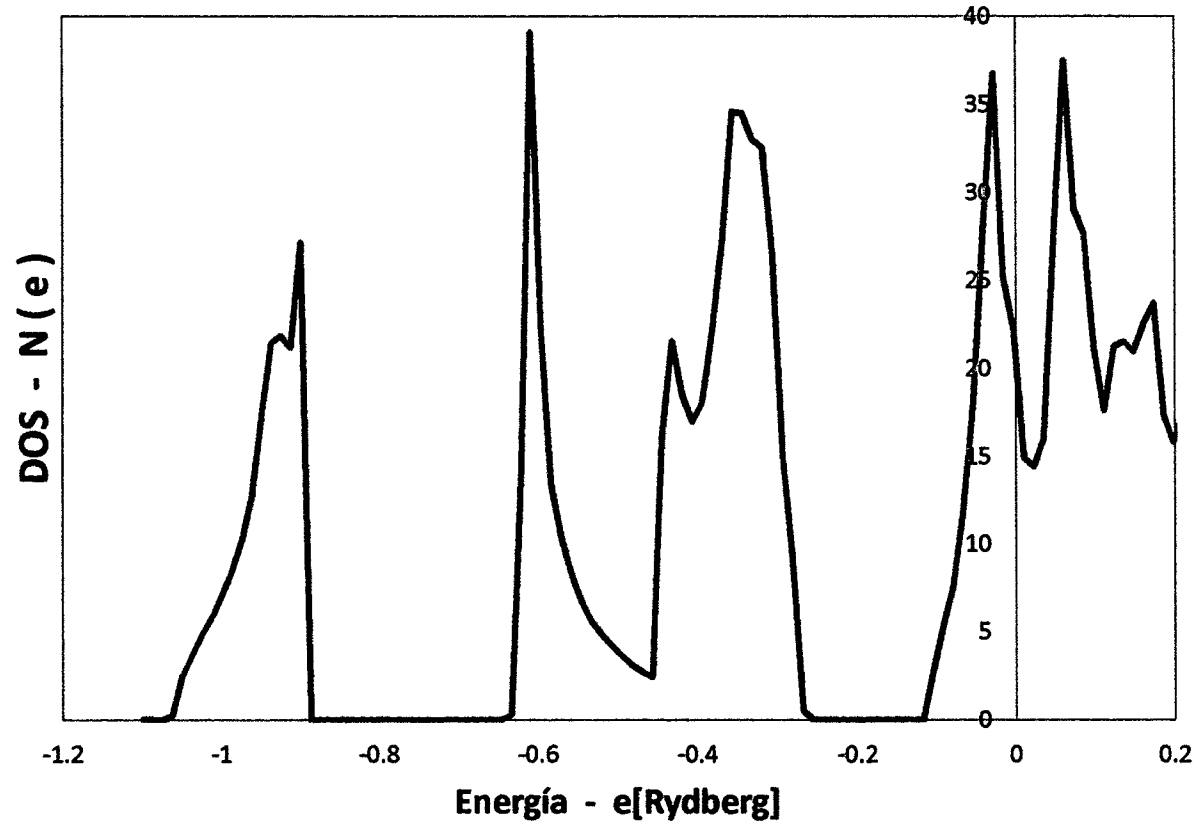
GRÁFICA N° 6.9.- Resultados de la presente investigación.

Densidad de Estados del AIP, $\gamma = 0.2$



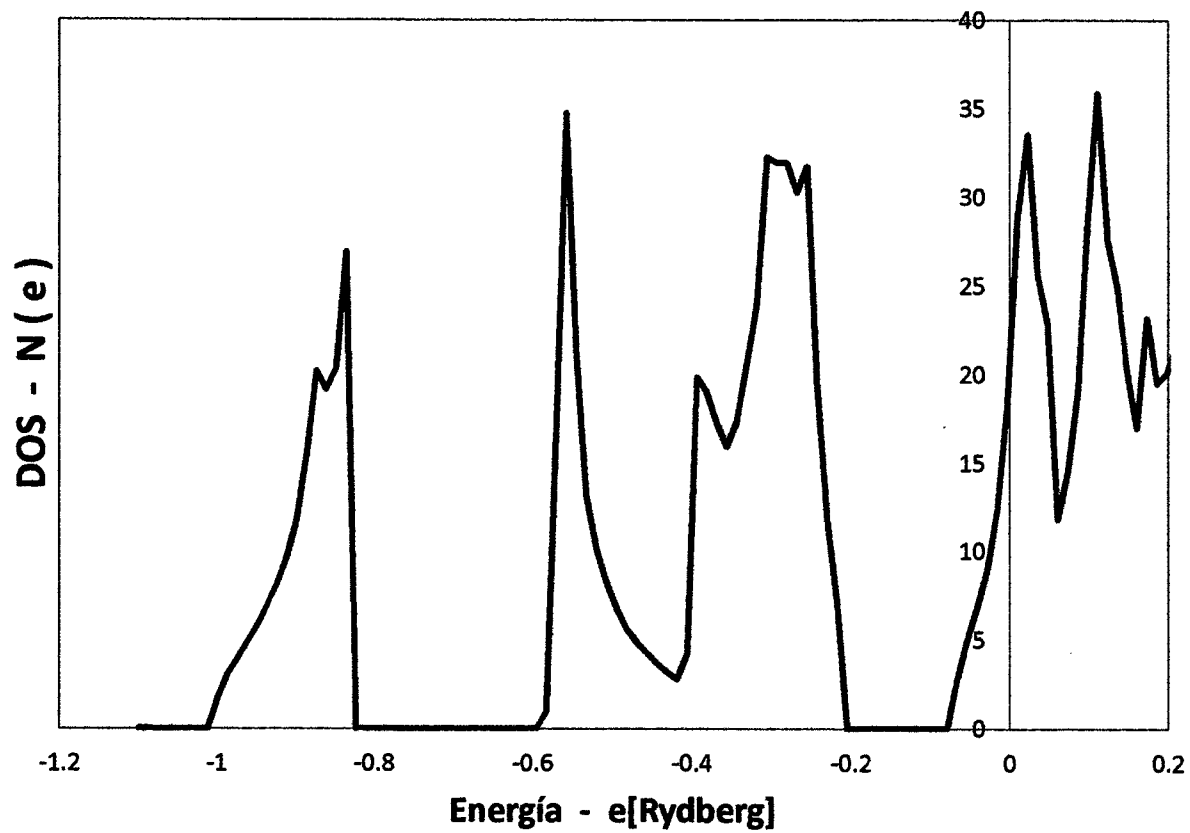
GRÁFICA N° 6.10.- Resultados de la presente investigación.

Densidad de Estados del AIP, $g = 0.4$



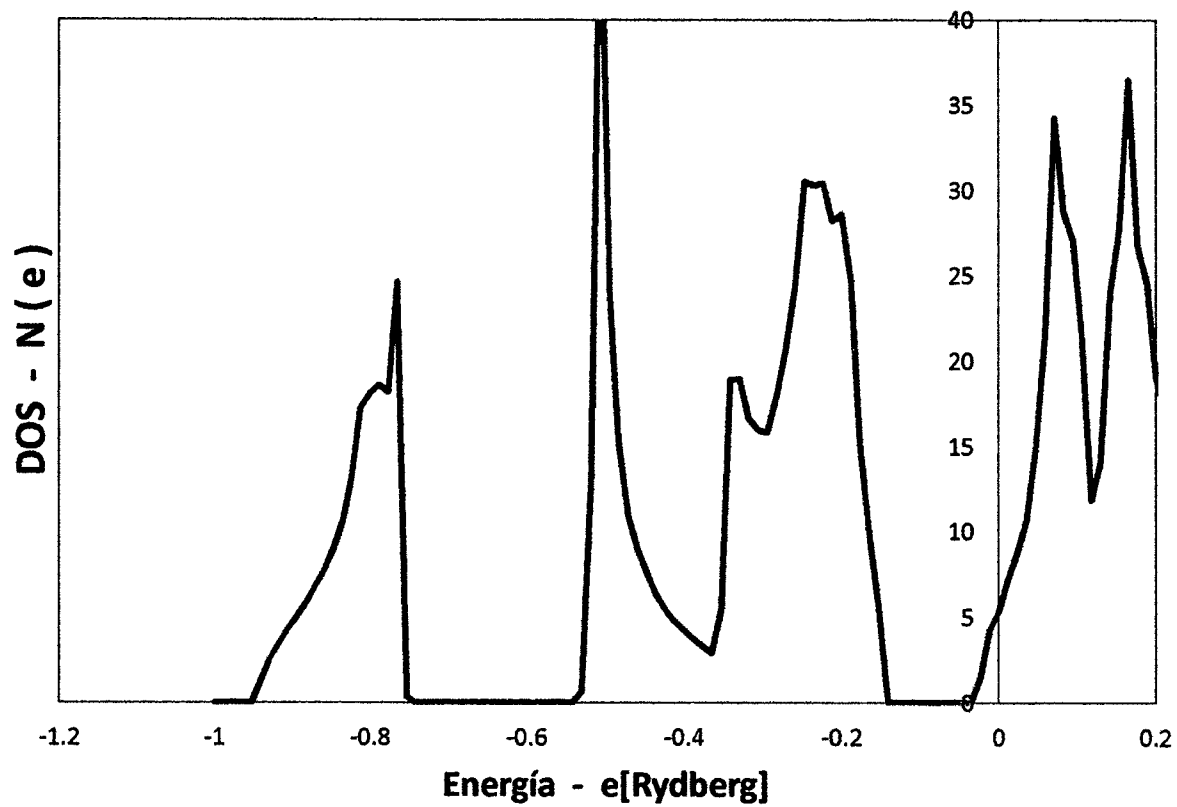
GRÁFICA N° 6.11.- Resultados de la presente investigación.

Densidad de Estados del AIP, $\gamma = 0.6$



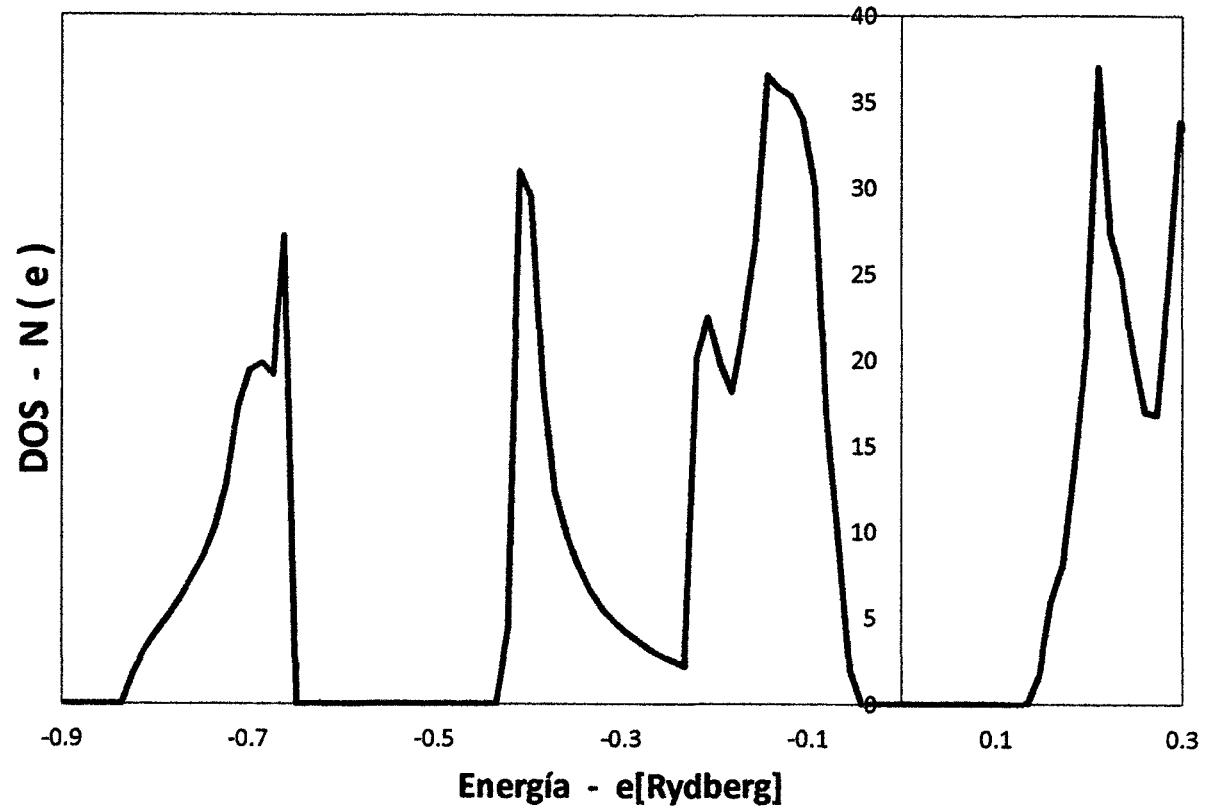
GRÁFICA N° 6.12.- Resultados de la presente investigación.

Densidad de Estados del AIP, $\gamma = 0.8$,



GRÁFICA N° 6.13.- Resultados de la presente investigación.

Densidad de Estados del AIP, $\gamma = 1.0$



GRÁFICA N° 6.14.- Resultados de la presente investigación.

Igualmente conocidos los parámetros potenciales de la base LMTO para el parámetro $\gamma = 1.0$, también se calcula la densidad de estados $N(\epsilon)$ en función de la energía. Los resultados se muestran a continuación.

TABLA N° 6.8

Densidad de Estados $N(\epsilon)$ del AIP obtenidos para $\gamma = 1.0$							
La energía ϵ en unidades Rydberg							
ϵ	$N(\epsilon)$	ϵ	$N(\epsilon)$	ϵ	$N(\epsilon)$	ϵ	$N(\epsilon)$
-0.900	0.000	-0.484	0.000	-0.156	26.845	0.222	27.395
-0.862	0.000	-0.471	0.000	-0.144	36.533	0.234	24.927
-0.837	0.000	-0.446	0.000	-0.131	35.791	0.247	20.520
-0.824	1.818	-0.434	0.000	-0.118	35.348	0.260	17.016
-0.812	3.167	-0.421	4.357	-0.106	34.012	0.272	16.836
-0.799	4.151	-0.408	30.954	-0.093	30.048	0.285	24.386
-0.787	5.127	-0.396	29.479	-0.081	16.841	0.297	33.850
-0.774	6.119	-0.383	18.372	-0.068	9.918	0.310	33.015
-0.761	7.253	-0.371	12.311	-0.055	1.963	0.323	27.000
-0.749	8.525	-0.358	9.758	-0.043	0.000	0.335	24.788
-0.736	10.214	-0.345	7.989	-0.018	0.000	0.348	19.182
-0.724	12.737	-0.333	6.611	-0.005	0.000	0.361	18.931
-0.711	17.276	-0.320	5.548	0.020	0.000	0.373	21.247
-0.698	19.411	-0.308	4.848	0.033	0.000	0.386	19.969
-0.686	19.819	-0.295	4.234	0.058	0.000	0.398	20.631
-0.673	19.149	-0.282	3.690	0.071	0.000	0.411	22.354
-0.661	27.171	-0.270	3.209	0.096	0.000	0.424	21.855
-0.648	0.000	-0.257	2.806	0.121	0.000	0.436	16.122
-0.623	0.000	-0.245	2.486	0.134	0.000	0.449	16.064
-0.597	0.000	-0.232	2.190	0.146	1.719	0.461	19.000
-0.585	0.000	-0.219	20.142	0.159	5.886	0.474	20.520
-0.560	0.000	-0.207	22.469	0.171	8.114	0.487	25.674
-0.547	0.000	-0.194	19.771	0.184	13.930	0.499	22.232
-0.522	0.000	-0.182	18.160	0.197	20.698	0.512	19.300
-0.509	0.000	-0.169	21.882	0.209	37.019	0.524	21.778

Fuente: Resultados de la presente investigación.



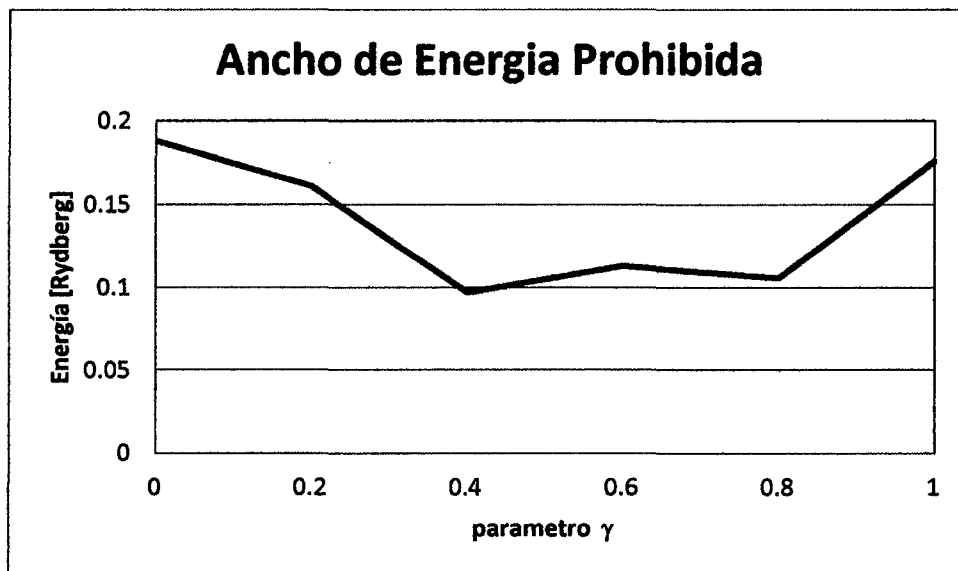
6.4 La Región de Energía Prohibida

Los diferentes valores que toma la región de energía prohibida de este sistema binario de AIP, permite saber indirectamente una posible transición de fase. Los resultados para algunos valores del parámetro γ , se muestran en la siguiente tabla.

TABLA N° 6.9
LA ENERGÍA PROHIBIDA DEL AIP

γ		0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
E_{gap}	(Ry)	0.188	0.161	0.097	0.113	0.106	0.176
	(eV)	2.56	2.19	1.31	1.54	1.44	2.40

Fuente: Resultados obtenidos en la presente investigación.



GRÁFICA N° 6.15.- Resultados de la presente investigación.

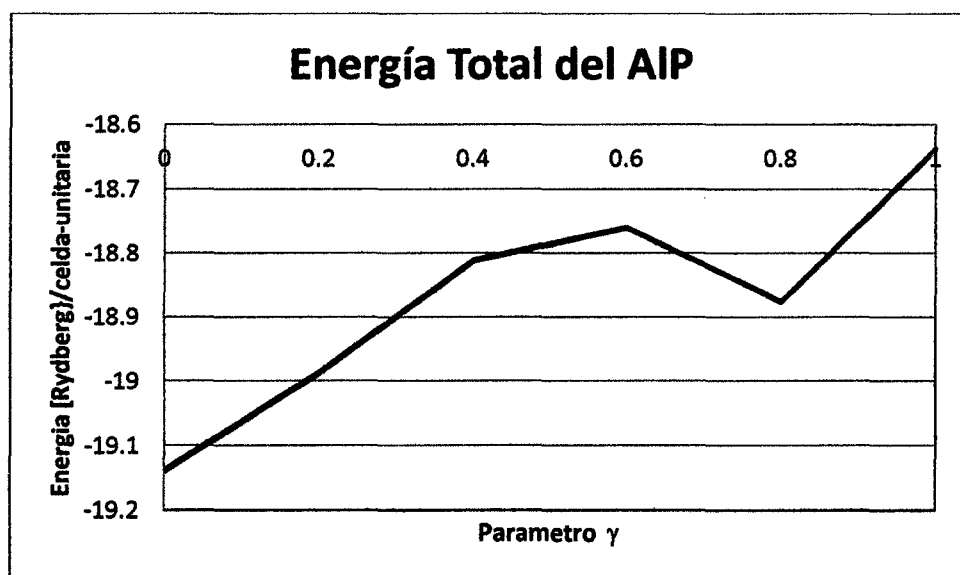
6.5 La energía total

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

**TABLA N° 6.10
LA ENERGÍA TOTAL**

γ		0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
E_T	(Ry)	-19.138	-18.987	-18.811	-18.760	-18.876	-18.638
	(eV)	-260.28	-258.22	-255.83	-255.14	-256.71	-253.48
E_{fermi}	(Ry)	-0.380	-0.313	-0.255	-0.205	-0.141	-0.043
	(eV)	-5.168	-4.257	-3.468	-2.788	-1.917	-0.069

Fuente: Resultados de la presente investigación



GRÁFICA N° 6.16.- Resultados de la presente investigación.

VII DISCUSION

7.1 El potencial efectivo

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

Los resultados del cálculo para el potencial efectivo de las esferas atómicas de fósforo se aprecian en la GRAFICA N° 6.1 de la página 35, los resultados del potencial para las esferas de aluminio se aprecian en la GRAFICA N° 6.2 de la página 38. En ambos casos las graficas muestran que el potencial efectivo resulta energéticamente más profundo cuando $\gamma = 0.0$, lo que corresponde para una máxima transferencia de carga electrónica a la red cristalina. El potencial efectivo es energéticamente menos profundo cuando $\gamma = 1.0$, que corresponde para una mínima transferencia de carga electrónica a la red cristalina.

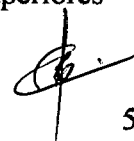
Los resultados del cálculo para el potencial de las esferas vacías, se aprecian en la GRAFICA N° 6.3 de la página 41. La grafica muestra que el potencial efectivo resulta energéticamente más profundo cuando $\gamma = 0$, lo que corresponde para una máxima transferencia de la carga electrónica. Y el potencial de las esferas vacías es energéticamente menos profundo cuando $\gamma = 1.0$, que corresponde a una mínima transferencia de la carga electrónica a estas esferas.

7.2 Las bandas de energía

Con el potencial efectivo determinado en 7.1 se resolvió la ecuación de Schrödinger, de la que se ha obtenido la relación de dispersión $\epsilon = \epsilon(\vec{k})$, lo que técnicamente constituye la estructura de las bandas de energía del sistema. El cálculo de las bandas de energía se ha repetido para algunos valores del parámetro γ entre 0 y 1. Las bandas de energía calculadas con $\gamma = 0$, que es para una máxima transferencia de carga a la red cristalina se aprecian en la GRAFICA N° 6.4 de la página 42, en esta se observa un excelente perfil para la estructura de las bandas de energía en las direcciones cristalográficas de alta simetría $L - \Gamma$, $\Gamma - X$, $K - \Gamma$, para el compuesto de AIP con estructura cristalina blenda de cinc.

Esta grafica presenta una estructura de bandas con una región de energía prohibida indirecta o gap indirecto, que queda justo por encima del tope de la banda de valencia que está ubicada en el punto Γ_{25} con un valor de energía de -0.290 Ry y la banda de conducción cerca del punto X con un valor de energía de -0.063 Ry. Esta región de energía prohibida está orientada hacia valores positivos de energía, tal como se puede apreciar en los resultados que se muestran en esta GRAFICA N° 6.4 de la pagina 42.

En la GRAFICA N° 6.5 de la pagina 43, se aprecia las bandas de energía calculadas para $\gamma = 0.2$ que corresponde a una menor transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías en la red cristalina. Estos resultados muestran un corrimiento de las bandas de valencia hacia valores superiores y



consecuentemente la región de energía prohibida disminuye para este porcentaje de la transferencia de la carga electrónica a la red, lo que implicaría que el sistema disminuya ligeramente su carácter de material semiconductor. Sin embargo esto empieza a cambiar conforme se aumenta el valor de γ lo que disminuye la transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red, tal como se pueden apreciar en los resultados para la estructura de las bandas de energía obtenidos con los valores del parámetro de transferencia $\gamma = 0.4$; $\gamma = 0.8$ que se muestran en la GRAFICA N° 6.6 de la pagina 43; la GRAFICA N° 6.7 en la página 44.

En estas graficas mencionadas, se puede observar un corrimiento hacia valores inferiores de energía (más negativos) de las bandas de valencia y consecuentemente se origina un pequeño gap entre la banda de banda valencia y la banda de conducción, con una tendencia a aumentar de magnitud.

En la GRAFICA N° 6.8 en la página 44, se muestran los resultados de la estructura de las bandas de energía obtenidos con $\gamma = 1.0$, que implica una mínima transferencia de la carga electrónica que reside fuera de las esferas atómicas hacia las esferas vacías de la red cristalina. En esta GRAFICA N° 6.8 se aprecia el desplazamiento de la estructura de bandas hacia valores de energía menos profundos, esto es, puntos de alta simetría en la dirección cristalográfica Γ cuyos valores son $\Gamma_1 = -0.825$ Ry y $\Gamma_{25} = -0.019$ Ry, lo que muestra un corrimiento de las bandas de valencia hacia valores negativos menos profundos,



consecuentemente una región de energía prohibida indirecta de mayor ancho entre la banda de valencia en el punto $\Gamma_{25} = -0.019$ Ry y la banda de conducción ubicada cerca del punto de alta simetría en $X = -0.825$ Ry. Los resultados muestran una excelente estructura de las bandas de energía para $\gamma = 0.0$, que corresponde u una máxima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, puesto que presenta el perfil característico para este material obtenidos con otros métodos.

7.3 La densidad de estados

Los resultados del cálculo de la densidad de estados (DOS) obtenidos para una máxima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, que corresponde a $\gamma = 0.0$, se muestran en la GRAFICA N° 6.9 en la página 49. En esta grafica se aprecia una DOS con una región de energía prohibida cuya brecha entre los estados de valencia y los estados de conducción se ubican en los puntos de energía $\epsilon = -0.38$ Ry y en el punto $\epsilon = -0.178$ Ry respectivamente.

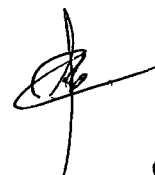
Además se observa que esta región de energía prohibida está desplazada hacia valores negativos de energía, con un perfil típico de la densidad de estados para este sistema obtenidos con otros métodos. La GRAFICA N° 6.10 en la página 50, muestra la DOS obtenidos con un 20% menos de la carga electrónica transferida a las esferas vacías de la red, lo que corresponde al valor $\gamma = 0.2$.



En esta grafica se aprecia una densidad de estados con una región de energía prohibida de menor brecha, el tope de los estados de valencia que está en el punto $\epsilon = -0.299$ Ry, es seguido del mínimo de los estados de conducción del sistema ubicado en el punto $\epsilon = -0.151$ Ry.

Los resultados que se aprecian en la GRAFICA N° 6.11 de la página 51, en la GRAFICA N° 6.12 de la pagina 52 y en la GRAFICA N° 6.13 de la página 53, se muestran la densidad de estados obtenidos con 40%, 60% y 80% menos de carga electrónica transferida a las esferas vacías en la red cristalina. En estos resultados se aprecia un desplazamiento de los estados de valencia hacia valores de energía negativa menos profunda, con una región de energía prohibida bien definida cuya brecha presenta una ligera tendencia a disminuir de valor, conforme aumenta la transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina.

La GRAFICA N° 6.14 en la página 54, muestra los resultados de la densidad de estados para $\gamma = 1.0$, que corresponde a una mínima transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina. Se observa un mayor desplazamiento de los estados de valencia y de conducción hacia valores de energía menos profundos, dando como resultado una región de energía prohibida bien definida cuya brecha se ubica entre el tope de los estados de valencia en el punto $\epsilon = -0.043$ Ry y el mínimo de los estados de conducción ubicado en el punto $\epsilon = 0.134$ Ry.




Este perfil de la densidad de estados para el valor $\gamma = 0.0$ que corresponde a la máxima transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red, está de acuerdo con los resultados obtenidos en trabajos de investigación con otros métodos y diferente tipo de orbitales, tales como: Electronic structure of AIP under pressure using semiempirical method de H. R. Jappor [1]; Band-Structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory de I. N. Remediakis [3].

7.4 La región de energía prohibida

Los resultados del cálculo para la región de energía prohibida que se dan en la Tabla N° 6.9 de la página 56, muestran que para $\gamma = 1.0$ con una mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, el sistema presenta una brecha de 0.176 Ry, que equivale a 2.39 eV, evidenciando el carácter semiconductor del sistema.

Para $\gamma = 0.8$, con un 20% de transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red, la región de la energía prohibida disminuye a 0.106 Ry. Para una mayor transferencia de carga electrónica a las esferas vacías, que son del orden 40%, 60% y 80% la brecha de la energía prohibida (el gap) experimenta ligeros cambios presentando un valor mínimo para $\gamma = 0.4$ con una brecha de 0.097 Ry, que corresponde a 1.32 eV, tal como se puede apreciar en la GRAFICA N° 6.15 de la página 56.



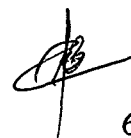
Estos ligeros cambios en la brecha de la energía prohibida evidencian una posible transición de fase de un carácter cerca del límite aislante a una fase más semiconductor.

Para $\gamma = 0.0$ que corresponde al 100% de la transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías en la red cristalina, la región de la energía prohibida queda bien definida con un valor de 0.188 Ry, aproximadamente 2.56 eV, que es del orden al valor experimental de 2.43 eV, y comparable al valor obtenido por Harrison [20] y en otras investigaciones con diferentes métodos.

7.5 La energía total

La tabla N° 6.8 en la página 57, muestra los resultados del cálculo de la energía total del estado fundamental del compuesto de AlP para diferentes valores del parámetro γ que se muestran en la tabla. La energía total es de -18.638 Ry para una mínima transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red, con una región de energía prohibida (gap) con una brecha de 0.176 Ry, que equivale a 2.39 eV.

Aunque el sistema presenta su carácter semiconductor para este valor del parámetro de transferencia de carga $\gamma = 1$, para $\gamma = 0.0$, que corresponde a una máxima transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red, la energía total del sistema es -19.138 Ry, resulta ser la energía mínima, con una región de energía prohibida de 0.188 Ry, equivalente a 2.56 eV, ligeramente de




mayor valor que para $\gamma = 1.0$, la mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina.

Tal como se aprecia en la GRAFICA N° 6.16 de la página 57, para $\gamma = 0.0$, una máxima transferencia de la carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, minimiza la energía total del compuesto de AlP con estructura cristalina blenda de cinc, lo que implica una mayor estabilidad del sistema.



XI REFERENCIALES

- [17] ANDERSEN Ole Krogh. **Band Structure of Transition Metals**. Physical Review B, Vol. 34: 5253. 1986.
- [19] ASHCROFT Neil. and MERMIN N. **Solid State Physics**. New York. Editorial: Holt, Rinehart and Winston. USA 1976.
- [7] CABRERA ARISTA, Cesar. **Uso de la Corrección de Auto-Energía en el Cálculo de la Estructura Electrónica de Sólidos Cristalinos**. Tesis de Licenciatura. Lima. Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas. 1996.
- [11] GALINDO A., PASCUAL P. **Mecánica Cuántica**. Madrid, España. Editorial: ALHAMBRA S.A. 1ra. Edición. 1978.
- [20] HARRISON W. A. **Electronic Structure and the Properties of Solids**. San Francisco. Editorial: Freeman. USA 1980.
- [9] HOHENBERG P. and KOHN W. Physical Review. Vol. 136: B846. 1964.
- [1] JAPPOR, H. P. **Electronic structure of AIP under pressure using semiempirical method**, The Open Condensed Matter Physics Journal, vol. 3, Pag.: 1-7, 2010.
- [12] JANAK J. F. Physical Review B, Vol. 18: 7165. USA 1978.
- [2] JAVANI, A. R. **Total energy, equation of states and bulk modulus of AIP, AIAs and AISb Semiconductors**, Indian Academy of Sciences, Pramana Journal Physics, vol. 64, N° 1, Pag.: 153-158, 2005.
- [4] H. L. SKRIVER, **The LMTO method**, New York, Springer, 1984



- [13] KOHN Walter. and SHAM Luis. J. Physical Review. Vol. 140: A1133. USA 1965.
- [8] LEVY M. Proc. Natl. Acad. Sci. Vol. 76: 6062. USA 1979.
- [16] MADELUNG O. **In Proceedings of the Ninth International Conference on the Physics of Semiconductors**, Edited S. M. Ryvkin. Vol. 1: 38. Moscow 1968.
- [5] NOWAK, H. J. **Electronic Properties of Solids**, Physical Review B, Vol. 44, Pag. 3577- 3579, 1991.
- [3] REMEDIAKIS, I. R. **Band-Structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory**, Physical Review B, vol. 59, Nº 8, Pag.: 5536-5543, febrero – 1999.
- [6] SKRIVER Hans L. **The Linear Muffin-Tin Orbitals (LMTO) Method**. Roskilde, Danish Natural Science Foundation. Denmark 1983.
- [14] SLATER J. C. **The Self-Consistent Field for Molecules and Solids**. New York. Editorial: McGraw-Hill. USA 1974.
- [10] VON DER LINDE W. **Efficient approach to the Ab-initio Hartree-Fock problem of solids with application to diamond and silicon**. Physical Review B Vol. 34: 1063. 1986.
- [15] VON BARTH U. and HEDIN L. Journal Physics C. Vol. 5: 1629. 1972
- [21] YIN WANG. **Electronic structures of III-V zinc-blende semiconductors from atomistic first principles**. arXiv:1303, 7419v1, cond-matt.mtrl-sci, mar-2013.



IX APENDICES

9.1 Apéndice A

Los parámetros potenciales de las esferas atómicas de fosforo, aluminio y de esferas vacías, calculadas con el método LMTO para una máxima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, necesarias para determinar las bandas de energía, todos en unidades Ry, se muestran a continuación.

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

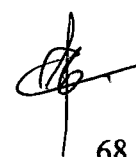
	Esferas de Fosforo			Esferas de Aluminio		
	s	P	d	S	p	d
E_{μ}	-1.2866	-0.3307	0.9945	-0.6463	0.2920	1.3873
Q_{μ}	0.4020	0.0804	0.0193	0.4167	0.0901	0.0244
C_{μ}	-1.2866	-0.3307	0.9945	-0.6463	0.2920	1.3874
δ_{μ}	0.3494	-0.3201	0.2895	0.4157	-0.3729	0.3190
P	0.3486	0.3374	0.3651	0.2414	0.2282	0.3032

Fuente: Resultados de la presente investigación, en unidades Rydberg

TABLA N° 9.2
LOS PARAMETROS POTENCIALES, $\gamma = 0.0$

	Esfera vacía 1			Esfera vacía 2		
	s	P	d	S	p	d
E_{μ}	0.1278	1.2521	2.8372	0.1337	1.2580	2.8431
Q_{μ}	0.4038	0.0926	0.0391	0.4038	0.0926	0.0391
C_{μ}	0.1278	1.2521	2.8372	0.1337	1.2580	2.8431
δ_{μ}	0.4156	0.4073	0.4033	0.4156	0.4073	0.4033
P	0.3145	0.2228	0.1815	0.3145	0.2251	0.1935

Fuente: Resultados de la presente investigación, en unidades Rydberg



Los parámetros potenciales de las esferas atómicas de fósforo, aluminio y de esferas vacías, calculadas con el método LMTO para una mínima transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, necesarias para determinar las bandas de energía, todos en unidades Rydberg, se muestran a continuación.

TABLA N° 9.3
LOS PARAMETROS POTENCIALES, $\gamma = 1.0$

	Esferas de Fósforo			Esferas de Aluminio		
	s	P	d	S	p	D
E_{μ}	-0.9150	0.0458	1.3818	-0.3784	0.5768	1.6927
Q_{μ}	0.4046	0.0822	0.0211	0.4194	0.0921	0.0263
C_{μ}	-0.9150	0.0458	1.3818	-0.3784	0.5768	1.6927
δ_{μ}	0.3723	-0.3401	0.3090	0.4329	-0.3887	0.3358
P	0.3197	0.3114	0.3342	0.2238	0.2328	0.2793

Fuente: Resultados de la presente investigación, en unidades Rydberg

TABLA N° 9.4
LOS PARAMETROS POTENCIALES, $\gamma = 1.0$

	Esfera vacía 1			Esfera vacía 2		
	s	P	d	S	p	d
E_{μ}	0.3777	1.5287	3.1335	0.3896	1.5406	3.1454
Q_{μ}	0.3987	0.0907	0.0381	0.3987	0.0907	0.0381
C_{μ}	0.3777	1.5287	3.1335	0.3896	1.5406	3.1454
δ_{μ}	0.3943	0.3943	0.3943	0.3943	0.3943	0.3943
P	0.3508	0.2412	0.1632	0.3508	0.2425	0.1075

Fuente: Resultados de la presente investigación, en unidades Rydberg



9.2 Apéndice B

Unidades atómicas empleadas

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

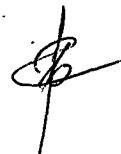
$$1 \text{ Ry.} = 1 \text{ Rydberg} = 13.6058 \text{ eV (Unidad de energía atómica)}$$

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

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

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

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



9.3 Apéndice C

Siglas empleadas

DOS = Density of Occupied States

EBS = Electronic Band Energy

LMTO = Linear muffin Tin Orbital

SDF = Spin Density Functional

LDA = Local Density Approximation

LSDA = Local Spin Density Approximation

ASA = Atomic Sphere Approximation

FCC = Face Center Cubic

FBZ = First Brillouin Zone

IFBZ = Irreducible First Brillouin Zone

E_F = Fermi Energy

E_g = Gap Energy

KS = Kohn - Sham

a. u. = atomic unit

Ry = Rydberg

eV = electrón-Volt



X ANEXOS

10.1 Anexo A

La estructura de las bandas de energía del AIP, obtenidas por Yin Wang, calculadas auto-consistentemente calculados con un potencial de intercambio semi-local. Fuente: Resultados obtenidos por Yin Wang [21].

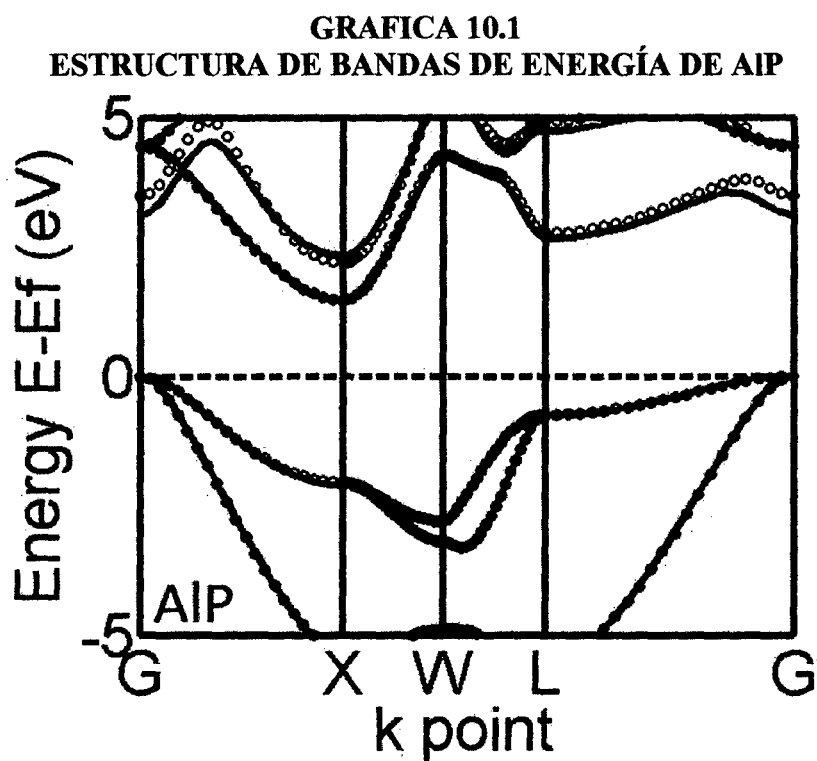


FIG. 1: (color online) The band structures for the III-V compound semiconductors obtained with LDA. Red line is obtained by VASP, blue circles obtained by Nanodsim.