

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO**  
**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**  
**UNIDAD DE INVESTIGACIÓN**



**PROYECTO DE INVESTIGACIÓN**

**“BRECHA DE ENERGÍA PROHIBIDA EN LA  
ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LA ALEACIÓN  
INDIO-ARSENICO InAs”**

**AUTOR: CÉSAR CABRERA ARISTA**

A handwritten signature in blue ink, likely belonging to César Cabrera Arista.

**Bellavista - Callao, 2021**



## INFORMACIÓN BÁSICA

FACULTAD

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN DE INGENIERÍA QUÍMICA

TÍTULO:

BRECHA DE ENERGÍA PROHIBIDA EN LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LA ALEACIÓN  
INDIO-ARSENICO (InAs)

EJECUTOR (es):

MG. CÉSAR CABRERA ARISTA

LUGAR DE EJECUCIÓN

LABORATORIO DE QUÍMICA DE LA FIQ

TIPO DE INVESTIGACIÓN

TEÓRICA BÁSICA

UNIDADES DE ANÁLISIS

ALEACIÓN DE ARSENIURO DE INDIO (InAs)



## INDICE

	Pag.
INTRODUCCIÓN.....	3
I PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	4
1.1 Descripción de la realidad problemática.....	4
1.2 Formulación del problema.....	4
1.2.1 Problema general.....	4
1.2.2 Problema específico.....	5
1.3 Objetivos.....	5
1.3.1 Objetivo general.....	5
1.3.2 Objetivos específicos.....	6
1.4 Justificación.....	6
1.5 Limitantes de la investigación.....	6
II MARCO TEÓRICO.....	7
2.1 Antecedentes.....	7
2.2 Bases teóricas.....	7
2.3 Conceptual.....	8
2.4 Definición de términos básicos.....	8
III HIPÓTESIS Y VARIABLES.....	9
3.1 Hipótesis.....	9
3.1.1 Hipótesis general.....	9
3.1.2 Hipótesis específica.....	9
3.2 Definición conceptual de las variables.....	9
3.3 Operacionalización de la variable.....	9
3.3.1 Definición operacional de la variable.....	9
IV DISEÑO METODOLÓGICO.....	10
4.1 Diseño de la investigación.....	10
4.1.1 Tipo.....	10
4.1.2 Diseño.....	10

	Pag.
4.2 Método de investigación.....	10
4.3 Población y muestra.....	10
4.4 Lugar del estudio.....	11
4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información.....	11
4.6 Plan de trabajo de campo.....	11
4.7 Análisis y procedimiento.....	11
V CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES.....	11
VI PRESUPUESTO.....	13
VII REFERENCIALES.....	13
ANEXOS.....	15



## INTRODUCCIÓN

Conocer la estructura electrónica de los materiales y de las aleaciones sólidas de InAs es de mucha importancia en la física del estado sólido, pues tiene una profunda influencia en las posibles y diversas aplicaciones tecnológicas que se les puede dar sobre todo a las aleaciones semiconductoras. En general para determinar las propiedades electrónicas de los materiales sólidos cristalinos se pueden emplear técnicas experimentales de alto costo como fotoluminiscencia muy complejas y sofisticadas, pero también se puede obtener de forma teórica para lo cual se debe formular la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino y ser resuelta con algún método o técnica de cálculo computacional, tal como el método de los orbitales lineales muffin-tin (Andersen et al., 1986), ó el método de la aproximación del gradiente generalizado para el potencial de intercambio y correlación (Tran & Blaha, 2009), el método de la combinación lineal de los orbitales Gaussianos LCGA (C. S. Wang & Klein, 1981), etc.

En 2013 Wang efectuó el estudio: Electronic structure of III-V zinc-blende semiconductors from first principles (Y. Wang et al., 2013b), en la que se reportan las propiedades electrónicas de semiconductores como InAs calculadas usando el modelo de Becke-Johnson en el potencial de intercambio para el cálculo de estructura de bandas. En 1999 Remediakis y Kaxiras publicaron el estudio: Band-Structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory, (Remediakis & Kaxiras, 1999), en la que se reportan el cálculo de las propiedades electrónicas de semiconductores entre ellos del arseniuro de indio (InAs) usando la teoría generalizada del funcional de la densidad.

En 2011 se efectúa el estudio: cálculos de primeros principios de las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos arsénicos XAs (X = In, Al, Sc) and electronic properties of arsenic compound (Simón, 2011), que usa el método de las ondas planas aumentadas linealizadas de potencial completo para calcular la estructura electrónica de la aleación InAs.

## I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

### 1.1 Descripción de la realidad problemática.

El compuesto binario arseniuro de indio (InAs) es un material semiconductor que pertenece al grupo III-V, con alta movilidad de electrones y brecha de energía prohibida directa estrecha. Tiene un gran potencial para muchas aplicaciones comerciales y nuevas tecnologías, establecidas en equipos electrónicos y dispositivos optoelectrónicos, como diodos emisores de luz, foto-detectores y láseres. El campo de la nanotecnología ha motivado el estudio de estrés de puntos cuánticos InAs/GaAs auto-ensamblados (Mercado, 2017), con propósito de controlar el tamaño, la densidad de puntos y disminución de los defectos cristalinos. La búsqueda de mejores desempeños y eficiencias del arseniuro de indio en dispositivos optoelectrónicos exigen conocer bien sus propiedades electrónicas, ópticas y de transporte. En 2016 se efectúa el estudio de las propiedades estructurales, elásticas, electrónicas y térmicas del InAs (Mendoza-Estrada et al., 2017), que calcula las propiedades electrónicas usando el método del pseudo potencial con teoría del funcional de la densidad LDA (Kohn et al., 1996) y la aproximación del gradiente generalizado con el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof (Perdew et al., 1996).

En 2013 se efectúa el estudio de la estructura electrónica de semiconductores III-V de estructura cristalina tipo blanda de cinc con primeros principios (Y. Wang et al., 2013b), que usa la teoría del funcional de la densidad con un término de intercambio semilocal reciente (Tran & Blaha, 2009), en este se calcula la brecha de la banda prohibida y las masa efectiva de algunos compuestos semiconductores representativos.

### 1.2 Formulación del problema



#### 1.2.1 Problema general

En general en el Perú no se cuenta con los equipos necesarios para efectuar un estudio experimental de las propiedades electrónicas de un material, sin embargo se puede efectuar un estudio teórico de la estructura electrónica del compuesto de Indio-Arsénico (InAs), que nos permita usar las propiedades electrónicas para analizar los cambios de la brecha de la energía prohibida y determinar otros efectos de forma indirecta, tal como posibles

transiciones de fase de la aleación arseniuro de indio (InAs). Estudio que use un modelo práctico como el método de los orbitales lineales muffin-tin o método LMTO (Andersen et al., 2007) que nos permita calcular las propiedades electrónicas, como la estructura de las bandas de energía, el perfil de la densidad de estados y de modo indirecto conocer la brecha de la energía prohibida del InAs. El gran riesgo de manipular la muestra material y el alto costo económico de los equipos o de técnicas experimentales es un problema para conocer estructura electrónica y la brecha de energía prohibida de esta aleación de arseniuro de indio, de modo que es ventajoso y económico un estudio teórico que permita resolver este problema, por lo que surge la pregunta:

¿Es posible conocer la brecha de energía prohibida en la estructura electrónica de la aleación de InAs resolviendo la ecuación de Schrödinger usando el método LMTO?

### **1.2.2 Problema específico**

- a) ¿Es posible conocer la estructura electrónica de la aleación de InAs resolviendo la ecuación de Schrödinger con el método LMTO?
- b) ¿Será posible calcular la brecha de energía prohibida en las bandas de energía y la densidad de estados DOS de la aleación InAs?

Como una alternativa de solución a la pregunta planteada, surge la presente investigación que usa la teoría del funcional de la densidad DFT (Kohn, 1999) y el método de los orbitales lineales muffin-tin ó LMTO (Skriver, 1984a) para calcular las propiedades electrónicas de aleaciones cristalinas.

## **1.3 Objetivos**

### **1.3.1 Objetivo general**

Estudiar la estructura electrónica de la aleación cristalina de arseniuro de indio (InAs) que en el estado fundamental presenta una red cristalina tipo blenda de cinc (zincblende), resolviendo la ecuación de Schrödinger para el sólido cristalino con el método LMTO y usando un potencial local formulado con la teoría del funcional de la densidad (DFT) (Perdew & Kurth, 2003) y en la aproximación LDA para el término de intercambio y correlación (Cabrera, 2018).

### **1.3.2 Objetivos Específicos**

- a) Resolver la ecuación de Schrödinger para para determinar las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) de la aleación InAs con red cristalina tipo zincblende.
- b) Calcular la brecha de energía prohibida en la estructura electrónica y de esta aleación InAs con red cristalina tipo zincblende.

### **1.4. Justificación**

Desde el punto de vista tecnológico la investigación se justifica porque el desarrollo de software de cálculo se constituye como parte de las herramientas propias en el Perú, haciéndonos autónomos e independientes, y también porque nos da la experiencia que podría ser usada en otras áreas de mayor prioridad nacional.

Se justifica como un aporte teórico porque la estructura electrónica es de mucha utilidad para calcular otras propiedades físicas de una aleación o material, pues a partir de la DOS se puede conocer otras propiedades tal como: la conductividad eléctrica, la conductividad térmica, siendo de utilidad académica y de gran beneficio para el sector industrial que utiliza los materiales semiconductores.

Se justifica económicamente porque reduce el riesgo y el alto costo de manipular los insumos que pueden resultar tóxicos. Es un aporte científico que contribuye con el desarrollo de software de cálculo considerado como herramienta.

### **1.5. Limitantes de la investigación**

Como es una investigación teórica básica no tiene limitantes en los aspectos de espacio tiempo, de metodología y de materiales. La investigación fue motivada por el interés de conocer las características de la estructura electrónica de aleaciones y nuevos materiales con 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 de la aleación de arseniuro de indio (InAs).



## II. MARCO TEÓRICO

### 2.1. Antecedentes

Como antecedentes internacionales hay muchos estudios técnicos que anteceden a este proyecto, se pueden tomar en cuenta los siguientes trabajos de investigación:

- Electronic structure of III-V zinc-blende semiconductors from first principles (Y. Wang et al., 2013a), que usa la reciente aproximación de Becke-Johnson en el potencial de intercambio para calcular las propiedades electrónicas de algunos materiales semiconductores representativos.
- Band-Structure calculations for semiconductors within generalized-density-functional theory, (Remediakis & Kaxiras, 1999) que usa el modelo teórico generalizado del funcional de la densidad para calcular la estructura electrónica de materiales semiconductores;
- Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloy, (Vurgaftman et al., 2001) que usa el método de la aproximación multi-bandas  $\vec{k}\cdot\vec{p}$  para el cálculo de las propiedades electrónicas de aleaciones semiconductoras del grupo III-V entre otros estudios.

Como antecedentes nacionales no hay investigación sobre la estructura electrónica de la aleación de arseniuro de indio (InAs), pero existen estudios de la estructura electrónica de materiales semiconductores usando el método de los orbitales lineales LMTO como:

- Estructura electrónica de la aleación AlAs, calculadas con el método LMTO, (Cabrera, 2020), que emplea un potencial local LDA para resolver la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino y obtener las bandas de energía y la densidad de estados con buenos resultados en la brecha de energía prohibida.

### 2.2 Bases teóricas

El marco de esta investigación teórica-básica es el campo de la física del estado sólido, aplicada en el área de la Materia Condensada. La estructura electrónica de la aleación de arseniuro de indio (InAs): las bandas de energía y la densidad de estados DOS son de mucha utilidad por su gran potencial de uso en aplicaciones optoelectrónicas y de nuevas tecnológicas, también para calcular otras diferentes propiedades físicas de un material o una aleación.

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., 2007), desarrollado en los 80s por el Prof. H. L. Skriver en Roskilde Dinamarca (Skriver, 1984b). En la década de los 90s el método LMTO es implementado por el Prof. alemán Dr. H. J. Nowak en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

### 2.3 Conceptual

Como se describe en el proyecto de estudio del compuesto de InP (Cabrera, 2020), “La estructura electrónica de la aleación arseniuro de indio (InAs) será conocida al determinar las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el sistema de partículas que conforman la red cristalina. Usando un potencial efectivo de interacción de los electrones con la red cristalina, formulado con teoría del funcional densidad DFT (Perdew & Kurth, 2003) y la aproximación de la densidad local LDA para el potencial de intercambio y correlación, se resuelve la ecuación de Schrödinger para el sólido cristalino con el método de los orbitales lineales Muffin-Tin (Zwierzycki & Andersen, 2009) o método LMTO por sus siglas en inglés.”

### 2.4 Definición de términos básicos

POTENCIAL EFECTIVO: Es el campo escalar de la red cristalina con el que interacciona el electrón en el sólido cristalino, su unidad en el SI es un Joule entre un Coulomb (1 J/C), que se conoce como un voltio (1V).

HAMILTONIANO: Es un operador de la mecánica cuántica es conformado por el operador cuántico de energía cinética y por el operador cuántico de energía potencial, en el SI su unidad de medida es un Joule (1J).

ENERGÍA: Es la cantidad escalar que mide la capacidad de generar o producir trabajo en forma de movimiento, luz, calor, etc., su unidad de medida en el SI es un Joule (1J).

VECTOR DE ONDA: Cantidad vectorial del espacio recíproco, que mide la frecuencia angular espacial con que se repite las dimensiones espaciales en un cristal, su unidad de medida en el SI es un radian por cada metro (1 rad/m).

### III HIPÓTESIS Y VARIABLES

#### 3.1 Hipótesis

##### 3.1.1 Hipótesis General

Es posible conocer la brecha de energía prohibida a partir de las propiedades electrónicas de una aleación binaria como la del arseniuro de indio (InAs), resolviendo la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino usando el método de los orbitales lineales muffin-tin y con las soluciones obtener la energía total.

##### 3.1.2 Hipótesis Específica

- a) Resolviendo la ecuación de Schrödinger con un potencial efectivo de la red cristalina en la aproximación LDA (Cabrera, 2018) se hallará la estructura electrónica de la aleación de InAs.
- b) Es posible calcular la brecha de energía prohibida en las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) de la aleación arseniuro de indio.

#### 3.2 Definición conceptual de variables

La variable independiente: **Vector de onda  $k$** , es la variable del espacio recíproco definida como  $2\pi$  rad entre la longitud de onda  $\lambda$ .

La variable dependiente: **Energía**, denotada con la letra  $\epsilon$ , es la energía que conforma la estructura de las bandas en el sistema cristalino.

##### 3.2.1 Operacionalización de las Variables

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

Energía: energía de las bandas  $\epsilon$ , es la variable dependiente, se mide en unidades atómicas Rydberg (1Ry), (1Ry = 13.6 eV).

## 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 arseniuro de indio (InAs) 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). 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:

1. La búsqueda de la información en referencia a la aleación de arseniuro de indio InAs.
2. El cálculo del potencial efectivo a partir de la densidad electrónica del sólido y el cálculo de los parámetros potenciales LMTO.
3. El cálculo de las bandas de energía y de la densidad de estados, resolviendo la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino de InAs.
4. Cálculo de la energía total 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 brecha de energía prohibida en la estructura electrónica del InAs, es la del método de los orbitales lineales muffin-tin o LMTO de O. K. Andersen (Andersen et al., 2007) y desarrollado por Hans L. Skriver (Skriver, 1984b)

### 4.3 Población y muestra

La muestra corresponde a una aleación de arseniuro de indio (InAs) en su fase cristalina sólida de tipo blenda de cinc (Zincblende).

#### **4.4 Lugar del estudio**

El estudio se debiera efectuar en el laboratorio de Física de los Laboratorios de Química de la Facultad de Ingeniería Química, UNAC.

#### **4.5 Técnicas e instrumentos de recolección**

Este proyecto es una investigación teórica básica.

#### **4.6 Análisis y procedimiento de datos**

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



### **V CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES**

El esquema de trabajo tiene por finalidad evaluar las actividades planificadas en la estructura del plan de la presente investigación, y para administrar el control de la investigación se divide en seis partes que se especifican en el cuadro de control por mes en la página siguiente.

### CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

MESES	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
	A	M	J	J	A	S	O	N	D	E	F	M
Búsqueda de información y material bibliográfico sobre el tema. (2 meses)	*	*										
Formulación del potencial y del método LMTO. (3 meses)		*	*	*								
Cálculo del potencial y de los parámetros potenciales de la base LMTO. (3 meses)				*	*	*						
Cálculo de las bandas de energía y de la densidad de estados. (2 meses)							*	*				
Cálculo de la energía total, energía de Fermi y análisis de resultados (2 meses)								*	*			
Impresión y presentación del informe final (3 meses)										*	*	*



## VI PRESUPUESTO

6.1 Recursos:

6.1.1 Investigador: Magister en Física

6.1.2 Miembros de Apoyo: ninguno.

6.2 Costo y Presupuesto.

PARTIDA	ESPECIFICACION	%	S/.	\$
a) 24	Alimentación	30%	S/. 3780	\$ 1021.6
b) 30	Materiales de consumo	40%	S/. 5040	\$ 1362.2
c) 32	Gasto de Transporte	30%	S/. 3780	\$ 1021.6
-----				
		TOTAL 100%	S/. 12600	\$ 3405.4

## 6.3 Financiamiento

FEDU



## VII REFERENCIALES:

Andersen, O. K., Pawlowska, 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, 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 AIAs 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)

- 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/jp960669l>
- 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. *Propiedades Estructurales, Elásticas, Electrónicas y Térmicas Del InAs: Un Estudio de Densidad Funcional.*, 26(46), 81–91.  
<http://10.0.74.109/01211129.v26.n46.2017.7320>
- Mercado, C. A. (2017). Estudio de Estrés de Puntos Cuánticos InAs/GaAs Autoensamblados [Universidad Autónoma San Luis de Potosí]. In *Universidad Autónoma San Luis de Potosí* (Vol. 4).  
<http://www.fc.uaslp.mx/pca/tesis/2017Maestria/MercadoOrnelasChristianAlejandro-Maestria60.pdf>
- 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>
- Simón, N. G. (2011). Cálculos de primeros principios de las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos arsénicos XAs ( X = In , Al , Sc ) and electronic properties of Arsenic compounds. *Tumbaga*, 6, 173–189.
- Skriver, H. L. (1984a). *The LMTO Method* (Vol. 41). Springer Berlin Heidelberg.  
<https://doi.org/10.1007/978-3-642-81844-8>
- Skriver, H. L. (1984b). *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>
- 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 I), 5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
- Wang, C. S., & Klein, B. M. (1981). First-principles electronic structure of Si, Ge, GaP, GaAs, ZnS, and ZnSe. I. Self-consistent energy bands, charge densities, and effective masses. *Physical Review B*, *24*(6), 3393–3416. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.24.3393>
- 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>
- Zwierzycycki, M., & Andersen, O. K. (2009). The Overlapping Muffin-Tin Approximation. *Acta Physica Polonica A*, *115*(10), 64–68. <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.115.64>

## VIII ANEXOS



**MATRÍZ DE CONSISTENCIA**  
**BRECHA DE ENERGÍA PROHIBIDA EN LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE ALEACIÓN InAs**

<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 brecha de energía prohibida en la estructura electrónica en la aleación de indio-Arsénico?	Hallar las propiedades electrónicas y de esta la brecha de energía prohibida, la energía total del InAs con red cristalina zincblende.	Resolviendo la ecuación de Schrödinger con el método LMTO permite conocer la estructura electrónica del InAs y de esta calcular la brecha de energía prohibida de la aleación InAs.	<b>V. INDEPENDIENTE</b> Vector de onda medido en rad/m	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 puede hallar la estructura electrónica de la aleación InAs con una red zincblende?  ¿Será posible calcular la brecha prohibida en la densidad de estados DOS de la aleación InAs con red cristalina zincblende?	Obtener la estructura electrónica de la aleación InAs con red cristalina zincblende.  determinar la brecha prohibida en las bandas de energía y la densidad de estados DOS de la aleación InAs.	Resolviendo la ecuación de Schrödinger para el sólido de InAs se obtendrá la estructura electrónica.  Las bandas de energía y la densidad de estados permiten hallar de forma indirecta la brecha de energía prohibida de la aleación InAs.	La energía de los estados electrónicos del sistema, medido en Rydberg.	ninguno	Método LMTO  Método de integración de Simpson



