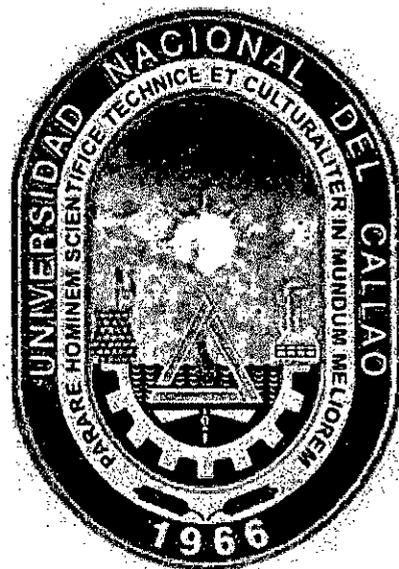




UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

OCT 2019

UNIDAD DE INVESTIGACION DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA



"ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y ENERGÍA PROHIBIDA EN ALEACIÓN CRISTALINA DE ALUMINIO-ARSENIO AIAs"

CÉSAR CABRERA ARISTA

Callao, 2019

PERÚ

Dedicada a mis hijos, Dana, Sofia y  
Pedro, la razón de mi esfuerzo diario  
y constante por mejorar

A handwritten signature in black ink, consisting of a stylized, cursive script that is difficult to decipher but appears to be a personal name or initials.

## ÍNDICE

	Página
ÍNDICE	1
TABLAS DE CONENIDO	4
Índices de Figuras	4
Índices de Gráficas	4
Índices de Tablas	5
RESUMEN	6
ABSTRAC	7
INTRODUCCIÓN	8
CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	9
1.1 Descripción de la realidad problemática	9
1.2 Formulación del problema.	10
1.3 Objetivos:	11
1.3.1 Objetivo general	11
1.3.2 Objetivos específicos	11
1.4 Limitantes de la investigación	11
CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO	12
2.1 Antecedentes	12
2.2 Marco:	12
2.2.1 Teórico	13
A.- Teoría del funcional de la densidad	13
B.- El método de Kohn-Sham	14
C.- La energía total del sistema	16
D.- El potencial efectivo	19
E.- El potencial del sólido cristalino	20
F.- El método LMTO	23

	Páginas
2.2.2 Conceptual	29
2.2.3 Teórico-conceptual	30
2.3 Definición de términos básicos	30
CAPÍTULO III: HIPÓTESIS Y VARIABLES	31
3.1 Hipótesis	31
3.2 Operacionalización de hipótesis	31
3.3 Operacionalización de las variables	31
CAPÍTULO IV: METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN	32
4.1 Tipo y diseño de la investigación.	32
4.2 Población y muestra.	32
4.3 Técnicas e instrumentos de recolección documental	32
4.4 Técnicas e instrumentos de recolección de campo	32
4.5 Análisis y procesamiento de datos.	32
CAPITULO V: RESULTADOS	33
5.1 Resultados descriptivos	33
5.1.1 El potencial efectivo del sólido	33
5.1.2 Los parámetros potenciales LMTO	35
5.1.3 Las bandas de energía del AIs.	36
5.1.4 La densidad de estados DOS	41
5.1.5 La energía total del sólido de AIs	45
5.2 Resultados inferenciales	46
5.3 Otro tipo de resultados según naturaleza de la hipótesis	46
CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS	47
6.1 Contrastación de hipótesis	47
6.1.1 La estructura electrónica del AIs.	47



	Páginas
6.1.2 La densidad de estados	47
6.1.3 La energía total del AIs.	48
6.2 Contratación de hipótesis con estudios similares	48
6.3 Responsabilidad ética	48
CONCLUSIONES	49
RECOMENDACIONES	49
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	50
ANEXOS	52
Equivalencias de sistemas de unidades	52
Siglas usadas	52
Matriz de consistencia	53



## TABLAS DE CONTENIDO

	Página
Índice de Figuras	
Figura N° 2.1	
Red cristalina del AlAs.	21
Índice de Gráficas	
Gráfica N° 5.1	
Potencial de Arsenio en cristal de AlAs.	33
Gráfica N° 5.2	
Potencial de Aluminio en cristal de AlAs.	34
Gráfica N° 5.3	
Potencial de esferas vacías en cristal de AlAs.	34
Gráfica N° 5.4	
Bandas de energía, $\gamma = 0.0$	40
Gráfica N° 5.5	
Bandas de energía, $\gamma = 0.2$	40
Gráfica N° 5.6	
Bandas de energía, $\gamma = 0.4$	40
Gráfica N° 5.7	
Bandas de energía, $\gamma = 0.6$	40
Gráfica N° 5.8	
Bandas de energía, $\gamma = 0.8$	41
Gráfica N° 5.9	
Bandas de energía, $\gamma = 1.0$	41
Gráfica N° 5.10	
La densidad de estados, $\gamma = 0.0$	43
Gráfica N° 5.11	
La densidad de estados, $\gamma = 0.2$	43



	Página
Gráfica N° 5.12	
La densidad de estados, $\gamma = 0.4$	44
Gráfica N° 5.13	
La densidad de estados, $\gamma = 0.8$	44
Gráfica N° 5.14	
La densidad de estados, $\gamma = 1.0$	45
Gráfica N° 5.15	
La energía total del sólido cristalino	46
Índice de Tablas	
Tabla N° 5.1	
Parámetros potenciales LMTO del AIAs.	35
Tabla N° 5.2	
Parámetros potenciales LMTO del AIAs.	36
Tabla N° 5.3	
Auto-valores de las bandas de energía, dirección $\Gamma - L$ .	37
Tabla N° 5.4	
Auto-valores de las bandas de energía, dirección $\Gamma - X$ .	38
Tabla N° 5.5	
Auto-valores de las bandas de energía, dirección $\Gamma - K$ .	39
Tabla N° 5.6	
Densidad de estados del AIAs.	42
Tabla N° 5.7	
Energía total del sólido cristalino de AIAs.	46



## RESUMEN

El presente trabajo es un estudio teórico de la estructura electrónica del estado fundamental de la aleación cristalina de Aluminio-Arsenio. Se determinan las bandas de energía y la densidad de estados (DOS) resolviendo la ecuación de Schrödinger con el método de los orbitales LMTO, para lo cual se usó un potencial efectivo del sólido cristalino formulado con la teoría del funcional de la densidad (DFT), que usa la aproximación LDA (Ceperley & Alder, 1980) para la energía de intercambio y de correlación.

De los resultados obtenidos para la estructura electrónica (las bandas de energía y la densidad de estados), entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción, justo en el punto  $\Gamma$ , se halló una brecha de energía prohibida de 0.214 Ry ó 2.91 eV que difiere en 6% del valor experimental de 3.09 eV reportado en la literatura (Vurgaftman, et al., 2001). La energía total del sólido cristalino resultó ser mínima con un valor de -17.87 Ry y corresponde a la estructura electrónica calculada con  $\gamma = 0.0$  una transferencia del 100% de la pequeña carga electrónica fuera de las esferas atómicas a las esferas vacías de la red cristalina.



## ABSTRACT

This work is a theoretical study of the electronic structure of the fundamental state of Aluminum-Arsenic crystalline alloy. Energy bands and state density (DOS) are determined by solving the Schrodinger equation with the LMTO orbital method, for which an effective potential of crystalline solid formulated with density functional theory (DFT) was used, using the LDA approach for exchange and correlation energy (Ceperley & Alder, 1980). The total energy of the crystalline solid proved to be minimal with a value of -17.87 Ry and corresponds to the electronic structure calculated with  $\gamma = 0.0$  a transfer of 100% of the small electronic load out of the atomic spheres to the empty spheres of the grid Crystal

From the results obtained for the electronic structure (energy bands and state density), between the maximum of the valence band and the minimum of the driving band, right at the point  $\Gamma$ , there was a forbidden energy gap of 0.214 Ry ó 2.91 eV, what is 6.0% different of the experimental value of 3.09 eV reported in the literature (Vurgaftman, et al., 2001). The total energy of the crystalline solid proved to be minimal with a value of -17.87 Ry and corresponds to the electronic structure calculated with  $\gamma = 0.0$  a transfer of 100% of the small electronic load out of the atomic spheres to the empty spheres of the grid Crystal.

## INTRODUCCIÓN

El conocimiento de las propiedades electrónicas de materiales y de aleaciones semiconductoras como la de Aluminio-Arsenio (AlAs) es de gran importancia en el campo de la materia condensada y la física del estado sólido. Los esfuerzos por conocer la estructura electrónica del AlAs son evidenciados con los artículos de investigación: Electronic structure of III-V zinc-blende semiconductors from first principles, (Wang, 2013); ó Total energy, equation of states and bulk modulus of AlP, AlAs and AlSb Semiconductors, (Jivani, 2005); ó Band-Structure calculations for semiconductors within generalized density functional theory, (Remediakis, 1999); con métodos teóricos y técnicas experimentales empleadas, muy sofisticadas y de alto costo para nuestro medio. (Cabrera Arista, 2018).

Las bandas de energía y la densidad de estados (la estructura electrónica) de la aleación de AlAs fueron calculadas resolviendo la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino con un potencial efectivo de tipo LMTO, potencial calculado con un término de intercambio y correlación en la aproximación LDA fundamentado en la teoría del funcional de la densidad (DFT). La brecha de energía prohibida (*gap*) se determinó indirectamente a partir de la estructura de las bandas de energía ya calculadas. La energía total se calculó con los auto-valores de energía de las bandas y con la misma densidad de carga electrónica que fue usada en el potencial efectivo previamente calculado.



## CAPÍTULO I: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

### 1.1 Descripción de la realidad problemática

Recientemente en esta última década en diversas universidades del mundo se han efectuado diferentes trabajos de investigación teóricos y experimentales a fin de conocer las propiedades electrónicas muchas aleaciones semiconductoras con estructura cristalina tipo blenda de cinc, como la del compuesto binario de Aluminio-Arsenio (AlAs). Entre los estudios teóricos más destacados se tiene la estructura electrónica de materiales semiconductores con red cristalina tipo blenda de cinc a partir de primeros principios (Wang, 2013); ó el estudio de la energía total, la ecuación de estados y los módulos de bulk de las aleaciones de AlP y AlAs (Jivani, 2005); ó la estructura de bandas calculadas para semiconductores usando la teoría del funcional de la densidad generalizada (Remediakis, 1999); o el estudio de la estructura de bandas con técnicas de espectroscopia óptica de alta resolución (Klahold, 2017) que usa una técnica experimental muy sofisticada y de alto costo para nuestro medio.

Según lo propuesto en el proyecto de investigación inicial (Cabrera Arista, 2018), el Perú carece de equipos experimentales sofisticados para realizar estudios experimentales sobre las propiedades electrónicas, sin embargo es posible realizar un estudio teórico de la estructura electrónica de la aleación Aluminio-Arsenio (AlAs) que permita conocer y usar la estructura electrónica para analizar la región de la energía prohibida de este material.

Las propiedades electrónicas de esta aleación de Aluminio-Arsenio se puede determinar usando el método de los orbitales lineales Muffin-Tin ó LMTO, inventado en la década de los 70s por O. K. Andersen (Andersen, 1975) investigador del Instituto Max-Planck de Stuttgart en Alemania y desarrollado en los 80s en Roskilde Dinamarca por H. L. Skriver (Skriver, 1984).

A inicios de la década de los 90s el método LMTO es implementado en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos por el profesor alemán Dr. H. J. Nowak (Nowak, 1991).

## 1.2 Formulación del problema.

La aplicación tecnológica de la aleación Aluminio-Arsenio (AlAs) depende principalmente de sus buenas propiedades electrónicas, tales como la estructura de las bandas de energía, la densidad de estados y la región de la energía prohibida, además de los cambios físicos que experimente el material bajo la acción de fuerzas y campos externos. Ciertamente el problema de conocer las propiedades electrónicas de esta aleación radica en el alto riesgo de los efectos nocivos de manipular la muestra, del gran costo económico de los equipos y de las técnicas experimentales para determinar las propiedades electrónicas. Por tanto, resulta económicamente ventajoso realizar una investigación teórica previa, que minimice el riesgo de manipulación y a la vez permita conocer la estructura electrónica de la aleación cristalina de AlAs.

Entonces como problema general surge la pregunta ¿Es posible conocer las propiedades electrónicas y la energía total de la aleación cristalina de AlAs? Como problemas específicos: ¿se podrá conocer el potencial efectivo con el que interacciona un electrón en el sólido de AlAs? ¿Es posible calcular las bandas de energía y la densidad de estados DOS con el potencial efectivo del sólido? ¿Se puede conocer la energía total de la aleación AlAs con de la estructura electrónica ya conocida? Ante estas preguntas surge como alternativa de solución la presente investigación, se formula un potencial efectivo usando la teoría del funcional de la densidad DFT (Perdew, 2003), con este potencial y el método LMTO (Skriver, 1984) se resuelve la ecuación de Schrödinger para calcular las propiedades electrónicas y la energía total del sólido cristalino.



### 1.3 Objetivos:

#### 1.3.1 Objetivo general

El objetivo general es conocer las propiedades electrónicas, como las bandas de energía, la densidad de estados y la energía total de la aleación cristalina de Aluminio-Arsenio (AlAs) resolviendo la ecuación de Schrödinger para el sólido con el método LMTO. Este compuesto de AlAs en su estado fundamental adopta la estructura cristalina tipo blenda de cinc (zincblende), El potencial del sólido cristalino se formulará con la teoría del funcional de la densidad (DFT) y con la aproximación LDA para el término de intercambio y correlación (Cabrera Arista, 2018) y con este resolver la ecuación de Schrödinger del sólido.

#### 1.3.2 Objetivos específicos

- a) Calcular el potencial de interacción electrónica del sólido (en la aproximación LDA) de la aleación de Aluminio-Arsenio con estructura zincblende.
- b) Determinar las bandas de energía, la densidad de estados (DOS) y la energía prohibida de la aleación Aluminio-Arsenio con estructura cristalina tipo zincblende.
- c) Calcular la energía total de la aleación Aluminio-Arsenio en su fase sólida con estructura cristalina tipo zincblende.

#### 1.4 Limitantes de la investigación

Como esta investigación sobre la estructura electrónica es de naturaleza básica y teórica no tiene limitantes en los aspectos de metodología y de materiales (Cabrera Arista, 2018).



## CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO

### 2.1 Antecedentes

El compuesto semiconductor de Aluminio-Arsenio tiene un gran potencial de uso en diversas aplicaciones tecnológicas, lo que ha llevado a recientes trabajos de investigación, tanto teóricos y experimentales sobre las propiedades electrónicas de este material. Como antecedentes al estudio de las propiedades electrónicas del AlAs en la presente investigación, se han tomado los siguientes trabajos de investigación: Estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de las interfaces  $\beta$ -SiC y semiconductores del grupo III-V (BN, AlN, AlAs, GaN, GaP) a partir de primeros principios (Zheng, 2001); o el estudio de la estructura electrónica de semiconductores tipo blenda de cinc a partir de primeros principios (Wang, 2013); ó el estudio que calcula la estructura de bandas de materiales semiconductores con teoría generalizada del funcional de la densidad (Remediakis, 1999); ó la investigación que estudia la energía total, la ecuación de estados y módulo de bulk de semiconductores de AlP, AlAs y AlSb (Jivani, 2005); ó el estudio estructural de los semiconductores de AlP, GaAs y AlAs con estructura cristalina tipo wurzita (Bautista-Hernández, 2003); entre otros trabajos.

### 2.2 Marco

Este trabajo sobre las propiedades electrónicas: las bandas de energía, la densidad de estados DOS de la aleación Aluminio-Arsenio 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) según lo planteado en el proyecto inicial de la investigación (Cabrera Arista, 2018). Los resultados de la presente investigación pueden ser contrastados con los resultados de investigaciones teórica y experimental publicadas en revistas internacionales de especialidad.



### 2.2.1 Teórico

#### A.- Teoría del funcional de la densidad (DFT)

Conocer la estructura electrónica de los materiales es de suma importancia en la física de la materia condensada, pues la estructura electrónica está relacionada con muchas otras de las propiedades físicas de los sólidos y de las aleaciones cristalinas como los metales, los semiconductores y los aislantes. En general, la teoría de la estructura electrónica de la materia tiene su fundamento en la ecuación de Schrödinger no relativista para un sistema de muchos electrones con una función de onda  $\psi$ , (Kohn, 1999), que es de la forma:

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

En esta ecuación (2.1) los términos  $\mathbf{r}_j$  denotan las posiciones de los electrones, los términos  $\mathbf{R}_l, Z_l$  denotan las posiciones y el número atómico de los núcleos; las otras cantidades en la ecuación (2.1):  $\hbar$  es la constante de Planck entre la constante  $2\pi$ ;  $m$  es la masa fundamental del electrón y  $e^2 = (e^+)^2 / (4\pi\epsilon_0)$  es la carga eléctrica fundamental del electrón multiplicada por la constante de Coulomb y  $E$  es la energía del sistema. La solución  $\psi$  de la ecuación de Schrödinger, es la función de onda electrónica de un sistema de  $N$  electrones depende de  $3N$  coordenadas espaciales y  $N$  coordenadas de spin.

En general el Hamiltoniano del sistema contiene términos espaciales de un electrón y de pares de electrones, esto conlleva a que la energía del sistema se escriba en términos de cantidades que implican solo seis coordenadas. En este sentido la función de onda del sistema contiene más información de la necesaria, lo que dificulta el cálculo computacional al resolver la ecuación de Schrödinger (2.1) con el fin de conocer la estructura electrónica.

Sin embargo, esta dificultad ha incitado en muchos investigadores la búsqueda de funciones de onda con menor cantidad de variables y que en la práctica se puedan utilizar para calcular la estructura electrónica, la energía y otras propiedades del sistema cristalino.

#### B.- El Método de Kohn – Sham

En un artículo publicado por Kohn y Sham, (Kohn & Sham, 1965), fue ideado un método práctico para obtener la densidad electrónica  $\rho$  y para obtener la energía  $E$  del estado fundamental. Método que en principio, es capaz de obtener resultados exactos, pero debido a que las ecuaciones de este método contienen un funcional desconocido que debe aproximarse, la formulación Kohn-Sham de la teoría del funcional de la densidad DFT da lugar a resultados aproximados. Este método consiste en escribir el valor medio de la ecuación (2.1) como un funcional  $F[\rho]$  que es la suma de tres diferentes partes, tal como se muestra en la siguiente ecuación

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

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

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

El último término  $E_{xc}[\rho]$  a la derecha de la ecuación (2.2), describe la energía potencial de correlación y de intercambio para este sistema de electrones.

Ya que la densidad de carga electrónica depende de los orbitales orto-normales  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  con número cuántico  $\alpha$ , la densidad de carga electrónica se escribe de la forma siguiente

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

Además el término de la energía cinética  $T[\rho]$  en (2.2), para este sistema de electrones sin interacción, también se puede escribir como

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

La minimización de la energía en el funcional de la ecuación (2.2), nos permitirá conocer la energía del estado fundamental del sistema, lo que se puede lograr siempre que el valor esperado del Hamiltoniano del sistema dado en unidades atómicas en la ecuación (2.1), y de la forma:

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

Se minimice con respecto a los orbitales  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  sujetos a una condición de restricción de la normalización de los orbitales  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ , como resultado, esto nos lleva a la ecuación de Euler – Lagrange

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

Siendo el término  $\epsilon_{\alpha}$  un multiplicador de Lagrange.



La aplicación directa de las técnicas matemáticas para hallar el valor extremo de la ecuación (2.7), nos conduce directamente a la ecuación diferencial:

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

Que es la ecuación auto-consistente de Kohn-Sham para un electrón que interactúa con un potencial efectivo  $V_{ef}(\vec{r})$ , (Kohn, 1999). Este potencial efectivo, escrito en unidades atómicas, y que actúa sobre el electrón en la red cristalina, ya contiene toda la información acerca de la red cristalina del material y es de la forma siguiente:

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

En esta ecuación (2.9) el primer término de la derecha  $v(\vec{r})$  es un potencial externo que describe la contribución de los otros núcleos atómicos de la red. El segundo término de la derecha en la ecuación (2.9) es el clásico potencial de interacción de Coulomb y el tercer término de la derecha de la ecuación (2.9) viene a ser el potencial de correlación y de intercambio del electrón, que tiene la forma:

$$v_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\partial E_{xc}[\rho(\mathbf{r})]}{\partial \rho(\mathbf{r})} \quad (2.10)$$

Los cálculos con la teoría del funcional de la densidad DFT, (Kohn, 1999), podrían dar resultados exactos siempre que el término de la energía de correlación y de intercambio fuese conocida y usada en los cálculos. En la mayoría de los cálculos con teoría del funcional de la densidad, prácticamente se hacen usando la aproximación de la densidad local (LDA).



### C.- La energía total del sistema

Con la ecuación (2.8) resuelta ya se conocen los auto-valores de energía y el siguiente paso del trabajo es el cálculo de la energía total con el propósito de tener resultados cuantitativos de las aproximaciones usadas en el presente trabajo de investigación y discutir la estabilidad del sistema bajo estas aproximaciones.

La energía total del sistema en la aproximación LDA, (Hohember & Kohn, 1964), se formula a partir de la ecuación (2.6), y que se escribe de la siguiente forma:

$$E = \sum_{\alpha,\sigma} f_{\alpha\sigma} \left\langle \psi_{\alpha\sigma} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \psi_{\alpha\sigma} \right\rangle + U[n] + E_{xc}[\rho] + \int n(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d^3r \quad (2.11)$$

En la que el primer término a la derecha en la ecuación (2.11), representa la energía cinética de los electrones, denotado por  $T$  es de la forma siguiente:

$$T = \sum_{\alpha,\sigma} f_{\alpha\sigma} \left\langle \psi_{\alpha\sigma} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \psi_{\alpha\sigma} \right\rangle \quad (2.12)$$

El segundo término a la derecha de la ecuación (2.11), denotado por  $U[n]$ , representa la clásica energía potencial de interacción de coulomb, y se escribe de la siguiente forma:

$$U[n] = \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.13)$$

El tercer término a la derecha de la ecuación (2.11), denotado por  $E_{xc}[n]$ , es la contribución de la energía de intercambio y de correlación en la aproximación LDA, (Kohn & Sham, 1965), la cual es de la forma:

$$E_{xc}[n] = \int d^3\vec{r} n(\vec{r})\epsilon_{xc}[n(\vec{r})] \quad (2.14)$$



El cuarto término a la derecha de la ecuación (2.11), es la contribución de un potencial escalar externo  $V(r)$ , que para nuestro caso es la conocida energía de Madelung, (Amador, 1991), que representa la interacción del electrón con los demás iones en el sólido:

$$V(\vec{r}) = \sum_i \frac{2z}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} \quad (2.15)$$

Por otro lado, una de las partes más difíciles de tratar en la formulación de la energía total, es el término que corresponde a la energía cinética, para salvar esta situación se recurre al siguiente artificio, la ecuación (2.8) se multiplica por la izquierda con el orbital  $\Psi_{\alpha\sigma}(\vec{r})$  y se suma sobre todos los orbitales ocupados, de este resultado se despeja la parte de la energía cinética y se obtiene la siguiente ecuación:

$$\sum_{\alpha,\sigma} f_{\alpha\sigma} \langle \Psi_{\alpha\sigma} | -\frac{1}{2}\nabla^2 | \Psi_{\alpha\sigma} \rangle = \sum_{\alpha,\sigma} \varepsilon_{\alpha\sigma} - \sum_{\alpha,\sigma} \int d^3\vec{r} \Psi_{\alpha\sigma}^*(\vec{r}) V_{ef}^{\sigma}(\vec{r}) \Psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) \quad (2.16)$$

Ecuación que expresa la energía cinética de los electrones en términos de los auto-valores de energía ya conocidos y en términos del potencial efectivo que apantalla al electrón. El último término a la derecha de esta ecuación (2.16), se escribe de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\sigma} \int d^3\vec{r} \Psi_{\alpha\sigma}^*(\vec{r}) V_{ef}^{\sigma}(\vec{r}) \Psi_{\alpha\sigma}(\vec{r}) &= \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ &+ \int d^3\vec{r} n(\vec{r}) v_{xc}(r) + \int d^3\vec{r} n(\vec{r}) v(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.17)$$

El reemplazo de esta ecuación (2.17) en la anterior ecuación (2.13), nos permite obtener una expresión bien general para determinar la energía total del estado fundamental del sistema en términos de los auto-valores de energía ya conocidos, en términos de la clásica energía de Coulomb y en términos de la energía de



correlación y de intercambio, (Kohn, 1999), la cual se puede escribir de la forma siguiente:

$$E = \sum_{\alpha,\sigma} \varepsilon_{\alpha\sigma} - \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_x[n] - \int d^3\vec{r} n(\vec{r}) v_x(\vec{r}) \quad (2.18)$$

La ecuación (2.18) es la forma más general de la energía total de un sistema de N partículas escrita en la aproximación LDA, (Hohember & Kohn, 1964).

#### D.- 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, (Andersen & Jepsen, 1994), nos permite formular el potencial efectivo de interacción electrónica únicamente con dependencia radial.

De manera que el potencial efectivo esta promediado sobre todo el ángulo sólido de la esfera atómica, lo que equivale a integrar sobre todo el ángulo solido de la esfera atómica y se puede escribir:

$$\langle V_{eff}(\vec{r}) \rangle = V_{eff}(r) \quad (2.19)$$

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:

$$V_{eff}(r) = 2 \int_0^{S_R} \frac{4\pi r^2 n(r)}{r} dr + V_x[n(r)] + v_{ion}(r) \quad (2.20)$$



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 campo de potencial efectivo real.

Esta última ecuación (2.20) para el potencial efectivo y con la técnica de separación de variables, es posible 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:

$$\frac{d^2 P_l(r)}{dr^2} + \left[ \epsilon_l + \frac{l(l+1)}{r^2} - V_{\text{eff}}(r) \right] P_l(r) = 0 \quad (2.21)$$

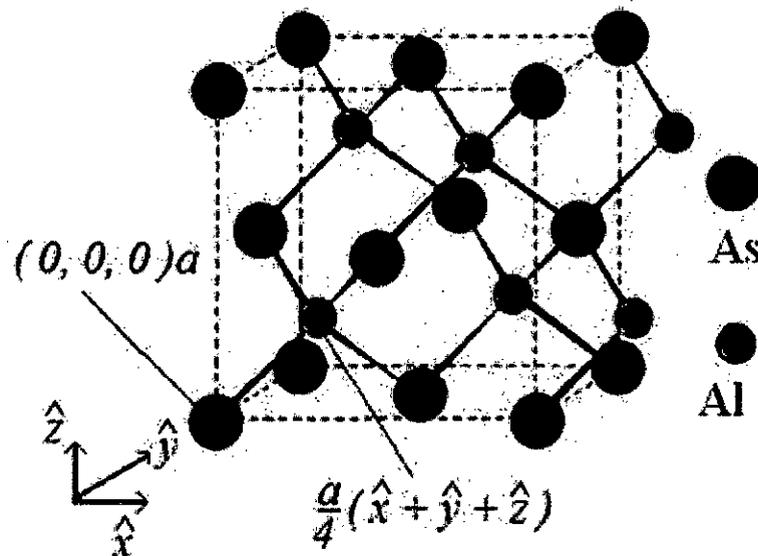
Como vemos esta ecuación (2.21) depende del número cuántico principal " $l$ ", donde  $l = \alpha$ , representa la clase de orbital en la solución de (2.21). Aquí no se trata explícitamente la parte angular de la ecuación diferencial de Schrödinger, puesto que sus soluciones los armónicos esféricos ya se encuentran tabulados en la literatura de especialidad (Jackson, 1980).

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

En su estado fundamental el compuesto binario de Aluminio-Arsenio presenta una fase sólida con una estructura cristalina tipo blenda de cinc (zincblende), con una constante de red  $a = 5.62 \text{ \AA}$ , (Cohen & helikowsky, 1988). Esta es una estructura cristalina abierta, se puede considerar como dos redes de Bravais, desplazadas una de la otra, un cuarto de longitud de la diagonal de la celda cubica cristalina. Por tanto esta red cristalina puede ser vista como dos redes FCC superpuestas, con puntos de base en  $(0,0,0)a$  y  $(1,1,1)a/4$ . Esta red se puede apreciar en la Figura 4.1 en la siguiente página.



FIGURA N° 2.1  
RED CRISTALINA DEL AlAs



Fuente: Electronic structure of crystalline materials, (Eyert, 2008)

Como la red 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 del mismo tamaño que las otras esferas atómicas de la red cristalina, a estas esferas vacías se les transfiere aquella pequeña parte de la carga electrónica de valencia que está fuera del radio de las esferas atómicas.

La transferencia de esta pequeña carga se hace mediante el parámetro sin unidades, denotado por  $\gamma$ , que varía entre 0 y 1, como la carga electrónica depende de este parámetro, el potencial del sólido también depende de  $\gamma$ . A causa de esta pequeña carga electrónica en las esferas vacías aparece una pequeña interacción entre las esferas vacías de la red cristalina y que se debe considerar en el potencial efectivo.

De modo que para el átomo que está centrado en la posición  $\mathbf{R}$ , el potencial efectivo  $V_R(r)$ , inicialmente descrito por la ecuación (2.20), que ya contiene toda

la información sobre la estructura de la red cristalina tipo blenda de cinc, ahora tiene la siguiente forma:

$$V^{\sigma\sigma}_{R_i}(r) = -\frac{2Z_{R_i}}{r} + \frac{1}{r} \int_0^r 2\sigma_{R_i}(r') dr' + \int_r^{s_R} \frac{2\sigma_{R_i}(r')}{r'} dr' + v_{xc}[n_{R_i}(r)] - \sum_{\vec{R}'} 2q_{\vec{R}'} \sum_{\vec{T}'} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}' - \vec{T}'|} \quad (2.22)$$

En la que el último término al lado derecho de esta ecuación (2.22) representa la contribución al potencial efectivo de las otras esferas vacías de la red cuando están cargadas con una pequeña fracción de la carga que esta fuera de las esferas atómicas, término que está dado por:

$$V_{M_i} = -\sum_{\vec{R}'}^4 2q_{\vec{R}'} \sum_{\vec{T}'} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}' - \vec{T}'|} \quad (2.23)$$

El apostrofe ' en la sumatoria significa que en la doble sumatoria se excluye el término  $\vec{R} = \vec{R}' + \vec{T}'$ . Siendo  $\vec{R}$  el vector de posición de la esfera vacía en el centro de la diagonal de la red cubica,  $\vec{R}'$  la posición de la segunda esfera vacía a lo largo de la diagonal de la red cubica y  $\vec{T}'$  el vector de posición de las otras esferas vacías de la red cristalina. Este término adicional (2.23) se conoce como el potencial de Madelung (Amador, 1991), y para determinar su contribución al potencial del sólido cristalino también se necesita conocer la pequeña carga electrónica que hay en las esferas vacías de la red cristalina.

Como las esferas vacías no poseen carga dentro de la coraza, para estas esferas vacías se cumple que la densidad de carga de la coraza es cero  $n_R^c(r) = 0$ . Aquí el problema es conocer la densidad de carga electrónica de los electrones de valencia  $n_R^v(r)$ , que es completamente diferente en el sólido que para el átomo libre y que se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger (2.8) auto-consistentemente.

#### F.- El método LMTO

Para el problema de calcular la estructura electrónica de un sólido cristalino, el método de los orbitales Muffin-Tin (MTO) está particularmente bien adaptado, (Wang, 2009). Los orbitales Muffin-Tin conforman un mínimo conjunto de base, que reduce el tamaño del Hamiltoniano y por tanto reduce el esfuerzo y el tiempo de cálculo computacional. En el cristal, el potencial cambia rápidamente cerca del sitio atómico y varía suavemente en la región intersticial.

Asumiendo que el potencial del cristal es de simetría esférica próxima a la región del sitio de una esfera atómica y que es plano en la región intersticial, en esta aproximación el potencial Muffin-Tin  $V_{MT}$ , se define como

$$V_{MT}(\vec{r}) = \begin{cases} V_{ext}(\vec{r}), & r \leq s_{\bar{R}} \\ V_o, & r > s_{\bar{R}} \end{cases} \quad (2.24)$$

En la que  $s_{\bar{R}}$  es el radio de las esferas atómicas Muffin-Tin. Esto nos simplifica considerablemente el problema, la función de onda ahora puede ser expresada en términos de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para cada región, un producto de armónicos esféricos y una función de onda radial dentro de la esfera, de ondas planas en la región intersticial.

En la aproximación de las esferas atómicas (Skriver, 1984), se elige el radio S de manera que el volumen de todas las esferas Muffin-Tin dentro de la red sea igual al volumen de la red cristalina, lo que significa que las esferas tienen una ligera superposición.



Además la energía cinética fuera de la esfera Muffin-Tin, se toma como igual a cero. Para la ecuación de Schrödinger, en la que el potencial y la energía E están escritas en unidades de energía atómica Ry, esto se traduce en

$$[-\nabla^2 + V(\vec{r}) - E] \psi(\vec{r}) = 0; \quad r \in A \quad (2.25a)$$

$$-\nabla^2 \psi(\vec{r}) = 0; \quad r \in I \quad (2.24b)$$

Donde A es la región dentro de la esfera atómica, I es la región intersticial. De modo que, como ya hemos establecido la energía cinética en la región intersticial como cero, la función de onda del electrón satisface la ecuación de Laplace en la región intersticial. Por tanto, definiendo la nueva cantidad  $\vec{r}_{\vec{R}} = \vec{r} - \vec{R}$  y  $r = |\vec{r}|$ , ahora podemos escribir el potencial  $V(\vec{r})$  de la forma:

$$V(\vec{r}) = V_{\vec{R}}(r_{\vec{R}}), \quad r_{\vec{R}} \leq S_{\vec{R}} \quad (2.25)$$

Donde  $V_{\vec{R}}(r_{\vec{R}})$  es un potencial de simetría esférica dentro de la esfera atómica de radio  $S_{\vec{R}}$ , situada en la posición  $\vec{R}$ . Fuera de la esfera atómica, donde las funciones de onda satisfacen la ecuación de Laplace, las soluciones son de la forma

$$\psi(\vec{r}) = u_l(\vec{r}) Y_L(\hat{r}) \quad (2.26)$$

Con  $\hat{r} = \vec{r}/r$  y con el subíndice L representando a los números cuánticos  $l, m$  la cantidad  $Y_L(\hat{r})$  representan los armónicos esféricos y la función  $u_l(\vec{r})$  una amplitud radial, que es la solución de la ecuación radial de Laplace, dada por:

$$-\frac{\partial^2 u_l(r)}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial u_l(r)}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) = 0 \quad (2.27)$$



Que tiene dos soluciones, una solución ordinaria y otra solución no ordinaria.

Ambas soluciones de la ecuación de Laplace (2.27) tienen la forma:

$$J_L(r) = J_l(r)Y_L(\hat{r}), \quad J_l(r) = \frac{1}{2(2l+1)} \left(\frac{r}{\omega}\right)^l, \quad (2.28a)$$

$$K_L(r) = K_l(r)Y_L(\hat{r}), \quad K_l(r) = \left(\frac{r}{\omega}\right)^{-l-1}, \quad (2.28b)$$

En ambas ecuaciones la cantidad  $\omega$  hace a las funciones sin dimensión.

Por otro lado los armónicos esféricos usados aquí son reales y satisfacen la condición de orto-normalidad:

$$\int Y_L(\hat{r})Y_{L'}(\hat{r})d^2\hat{r} = \delta_{LL'} \quad (2.29)$$

Las soluciones centradas en los orígenes de las diferentes esferas atómicas, es decir las soluciones  $J_L(\vec{r}_{\vec{R}})$  y  $K_L(\vec{r}_{\vec{R}})$  están relacionadas una con cada otra, ya que la solución no ordinaria  $K_L(\vec{r}_{\vec{R}})$  centrada en la posición  $\vec{R}$  puede ser expandida en términos de la solución ordinaria  $J_{L'}(\vec{r}_{\vec{R}'})$  que está centrada en la posición  $\vec{R}' \neq \vec{R}$ , mediante la expresión

$$K_L(r_{\vec{R}}) = - \sum_{L'} S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'} J_{L'}(r_{\vec{R}'}) \quad (2.30)$$

En la que  $S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'}$  son las llamadas constantes de estructura canónicas, siendo simétricas ( $S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'} = S_{\vec{R}'L', \vec{R}L}$ ) y con dependencia de la potencia inversa de la distancia  $|\vec{R} - \vec{R}'|$ , tienen la forma:

*[Handwritten signature]*

$$S_{\vec{R}_L, \vec{R}'_L} \propto \left( \frac{\omega}{|\vec{R} - \vec{R}'|} \right)^{l+l'+1} \quad (2.31)$$

Para un solo potencial, de simetría esférica, centrado en  $\vec{R}$ , la ecuación (2.25a) dentro de la esfera ( $r < s_{\vec{R}}$ ) está dado como

$$[-\nabla^2 + V_{\vec{R}}(r) - E] \phi_{\vec{R}_L}(\vec{r}, E) = 0 \quad (2.32)$$

Y las soluciones  $\phi_{\vec{R}_L}(\vec{r}, E)$  para una energía dada E, esta dado por

$$\phi_{\vec{R}_L}(\vec{r}, E) = \phi_{\vec{R}_l}(r, E) Y_L(\hat{r}) \quad (2.33)$$

Con  $\phi_{\vec{R}_l}(r, E)$  satisfaciendo la parte radial de la ecuación de Schrödinger, dada por

$$\left[ -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_{\vec{R}}(r) - E \right] \phi_{\vec{R}_l}(r, E) = 0 \quad (2.34)$$

Una vez más, se obtienen soluciones regulares e irregulares cuando se toma en cuenta el comportamiento asintótico para  $r \rightarrow 0$ , las soluciones regulares tiene dependencia  $r^l$  y las soluciones irregulares una dependencia  $r^{-l-1}$ . Las soluciones dentro de la esfera atómica y las de la región intersticial ahora deben combinarse para formar la solución completa en la ASA (Skriver, 1984), con una función resultante y su primera derivada que debe ser continua en el límite de la esfera ( $r = s_{\vec{R}}$ ).

Teniendo en cuenta las condiciones de contorno, la solución regular de (2.34) dentro de la esfera con  $\phi_{\vec{R}_l}(r, E) \propto r^l$  para  $r \rightarrow 0$ , y la solución no ordinaria

$K_L(\vec{r})$  de la ecuación de Laplace que decae fuera de la esfera, puesto que  $\phi_{\vec{R}l}(r, E) \rightarrow 0$  para  $r \rightarrow \infty$ . De esta manera la función de onda: Muffin-Tin Orbital o MTO por sus siglas en inglés, tiene la forma siguiente:

$$\phi_L(\vec{r}, \varepsilon) = i^l Y_L(\hat{r}) \begin{cases} u_l(r, \varepsilon), & r \leq s_{\vec{R}} \\ \left[ \frac{D_l + l + 1}{2l + 1} \left( \frac{r}{s_{\vec{R}}} \right)^l + \frac{l - D_l}{2l + 1} \left( \frac{r}{s_{\vec{R}}} \right)^{-l-1} \right] u_l(s_{\vec{R}}, \varepsilon), & r > s_{\vec{R}} \end{cases} \quad (2.35)$$

En la que L representa ambos números cuánticos  $l$  y  $m$ , la función  $u_l(r, \varepsilon)$  es una solución de la ecuación radial de Schrödinger,  $Y_L(\hat{r})$  son los armónicos esféricos ya conocidas (Jackson, 1980) y la cantidad:

$$D_l(r, \varepsilon) = \frac{s_{\vec{R}}}{u_l(s_{\vec{R}}, \varepsilon)} \left. \frac{\partial u_l(r, \varepsilon)}{\partial r} \right|_{r=s_{\vec{R}}} \quad (2.36)$$

Es la derivada logarítmica  $u_l(r, \varepsilon)$  en el límite de la esfera atómica  $r = s_{\vec{R}}$ . Pero esta solución descrita en la ecuación (2.35) no se puede normalizar debido a que el factor  $\left( \frac{r}{s_{\vec{R}}} \right)^l$  es un término que diverge fuera de la esfera atómica, puesto que la distancia  $r$  tiende al infinito para valores mayores que el radio de Wigner-Seitz. Sin embargo quitando este término de la ecuación (2.35), obtenemos una solución de la ecuación de Schrödinger que se puede normalizar y tiene la forma:

$$\phi_L(\vec{r}, \varepsilon) = i^l Y_L(\hat{r}) \begin{cases} \frac{2l + 1}{l - D_l} \frac{u_l(r, \varepsilon)}{u_l(s_{\vec{R}}, \varepsilon)} - \frac{P_l(\varepsilon)}{2(2l + 1)} \left( \frac{r}{s_{\vec{R}}} \right)^l, & r \leq s_{\vec{R}} \\ \left( \frac{r}{s_{\vec{R}}} \right)^{-l-1}, & r > s_{\vec{R}} \end{cases} \quad (2.37)$$



En la que el término  $P_l(\varepsilon)$  es conocido como la función potencial y, está definido como:

$$P_l(\varepsilon) = 2(2l + 1) \frac{D_l(\varepsilon) + l + 1}{D_l(\varepsilon) - l} \quad (2.38)$$

#### G.- Los Orbitales Lineales Muffin-Tin

En un cristal, habrá un átomo centrado en la misma esfera atómica (Andersen & Jepsen, 1994). Dentro de cada esfera atómica la función de onda total es la suma de la función de onda de la esfera atómica propia y las colas de las otras esferas atómicas.

Sabiendo que la solución de la ecuación radial dentro de la esfera es  $u_l(r, E)$ , la combinación lineal de MTO centrada en diferentes átomos dados por la expansión

$$\psi(r, E) = \sum_{\vec{R}L} \phi_L(r_{\vec{R}}, E) C_{\vec{R}L} \quad (2.39)$$

Serán una solución de la ecuación de Schrödinger del cristal, si todos los términos  $\left(\frac{r}{s_{\vec{R}}}\right)^l$  se cancelan en el sitio central. Expandiendo las colas de las posiciones en  $\vec{R}' \neq 0$  con respecto a la posición central, como

$$i^l Y_L(\hat{r}_{\vec{R}}) \left(\frac{r_{\vec{R}}}{s_{\vec{R}}}\right)^{-l-1} = - \sum_{L'} \left(\frac{r_{\vec{R}'}}{s_{\vec{R}}}\right)^{l'} \frac{1}{2(2l' + 1)} i^{l'} Y_{L'}(\hat{r}_{\vec{R}'}) S_{\vec{R}'L'\vec{R}L} \quad (2.40)$$

*Handwritten mark*

Donde  $\vec{r}_{\bar{R}} = \vec{r} - \bar{\mathbf{R}}$ ,  $r_{\bar{R}} = |\vec{r} - \bar{\mathbf{R}}|$  y siendo  $S_{\bar{R}'L',\bar{R}L}$  las constantes de estructura, podemos escribir seguidamente la condición de cancelación de las colas, de la forma siguiente:

$$\sum_{\bar{R}'L'} [P_{\bar{R}L}(E)\delta_{\bar{R}\bar{R}'}\delta_{LL'} - S_{\bar{R}L,\bar{R}'L'}]C_{\bar{R}'L'} = 0 \quad (2.41)$$

Las constantes de estructura  $S_{\bar{R}L,\bar{R}'L'}$ , contienen toda la información acerca de la estructura del cristal, y la función potencial  $P_{\bar{R}L}(E)$  contiene toda la información acerca de los potenciales atómicos. De modo que esta ecuación se puede utilizar para calcular los auto-valores de la estructura de las bandas de energía  $\epsilon(\vec{k})$  en el espacio recíproco, si  $\bar{\mathbf{R}}'$  es sumado sobre todos los sitios de la red en un cristal y la función de onda es un estado de Bloch.

### 2.2.2 Conceptual

Las propiedades electrónicas de la aleación Aluminio-Arsenio se determinan al resolver la ecuación de Schrödinger para el sistema de partículas en un material sólido. Con un potencial inicial de interacción formulado con la teoría del funcional densidad (Perdew, 2003) y la aproximación de la densidad local LDA (Kohn & Sham, 1965) para el potencial de intercambio y correlación, se resuelve la ecuación de Schrödinger para el sólido cristalino usando el método de los orbitales lineales Muffin-Tin o método LMTO por sus siglas en ingles.

Este método fue inventado en la década de los 70s por el Prof. O. K. Andersen (Andersen, 1975) investigador del Instituto Max-Planck de Stuttgart en Alemania y desarrollado en los 80s por el Prof. H. L. Skriver en Roskilde, Dinamarca (Skriver, 1984). El método LMTO es una técnica de uso libre para el estudio de propiedades electrónicas, fácil de conseguir por internet. Al inicio de la década de los 90s el método LMTO es implementado por el Prof. alemán Dr. H. J. Nowak



(Nowak, 1991) en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos y está disponible para que se realicen estudios de pre y post grado en ciencias de los materiales.

### 2.2.3 Teórico Conceptual

La teoría del funcional de la densidad DFT (Perdew, 2003) permite enfocar el problema de resolver un sistema de muchas partículas, en un problema de resolver la ecuación de Schrödinger de un solo electrón que interactúa con un potencial efectivo del sólido cristalino. Ecuación que se puede resolver con el método de la base de orbitales lineales Muffin-Tin o método LMTO (Skriver, 1984).

### 2.2.4 Definición de términos básicos

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

**HAMILTONIANO:** Es un operador cuántico 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 una 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).



## CAPÍTULO III: HIPÓTESIS Y VARIABLES

### 3.1 Hipótesis

Conocer la estructura electrónica del AIA es posible resolviendo la ecuación de Schrödinger usando el método LMTO (Skriver, 1984), lo que permite hallar indirectamente la energía prohibida del material. Con los auto-valores de energía de las bandas y la densidad de carga electrónica usada en el potencial efectivo se puede calcular la energía total y la energía de Fermi del AIA.

Hipótesis General: Es posible determinar la estructura electrónica, como las bandas de energía y la densidad de estados, de la aleación cristalina de AIA resolviendo la ecuación de Schrödinger.

Hipótesis Específica: Con un potencial efectivo del sólido se puede resolver la ecuación de Schrödinger con el método LMTO y obtener las bandas de energía y la densidad de estados (DOS), lo que permite conocer indirectamente la energía prohibida, calcular la energía total y la energía de Fermi de la aleación cristalina de AIA.

### 3.2 Operacionalización de hipótesis

Los auto-valores de energía constituyen la estructura electrónica y la energía prohibida  $E_g = \epsilon_c - \epsilon_v$  es la diferencia entre los auto-valores de energía del fondo de la banda de conducción y del tope de la banda de valencia.

### 3.3 Operacionalización de las variables

La variable independiente es el vector de onda  $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$ , que toma las direcciones  $\Gamma - X$  con  $k = (0, 1, 0)$ ;  $G - K$  con  $k = (0, 1, 1)$  y  $\Gamma - L$  con  $k = (1, 1, 1)$ ,  $\text{rad}/a.u.$  La variable dependiente son los auto-valores de energía  $\epsilon_a$ , medidos convenientemente en unidades de energía atómica  $Ry$ .



## CAPÍTULO IV: METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

### 4.1 Tipo y diseño de la investigación.

El tipo de investigación que se realizó fue teórica-básica.

El diseño de la investigación se resumió en:

- a) Se recopiló información bibliográfica de referencia sobre la aleación de Aluminio-Arsenio y del método LMTO.
- b) Se calculó el potencial efectivo con la densidad electrónica del sólido, se calculó los parámetros potenciales requeridos por el método LMTO.
- c) Se calculó las bandas de energía, la densidad de estados resolviendo la ecuación de Schrödinger para sólido cristalino.
- d) Se calculó la energía total, se efectuó el análisis, conclusiones de los resultados y presentación del informe final.

### 4.2 Población y muestra.

El universo se resume al estudio de la aleación cristalina de Aluminio-Arsenio.

### 4.3 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información documental

Como es una investigación Teórica-básica, la técnica para la recolección de la información documental consistió en navegar y bajar de la red los artículos de investigación sobre estudios de la estructura electrónica relacionados al tema.

### 4.4 Técnicas e instrumentos para la recolección de la Información de campo

Ninguna. Investigación teórica-básica.

### 4.5 Análisis y procesamiento de datos.

Los datos se procesaron por medio de cálculos con programación en lenguaje fortran 90, los resultados se analizaron con gráficas de tipos XY.

## CAPITULO V: RESULTADOS

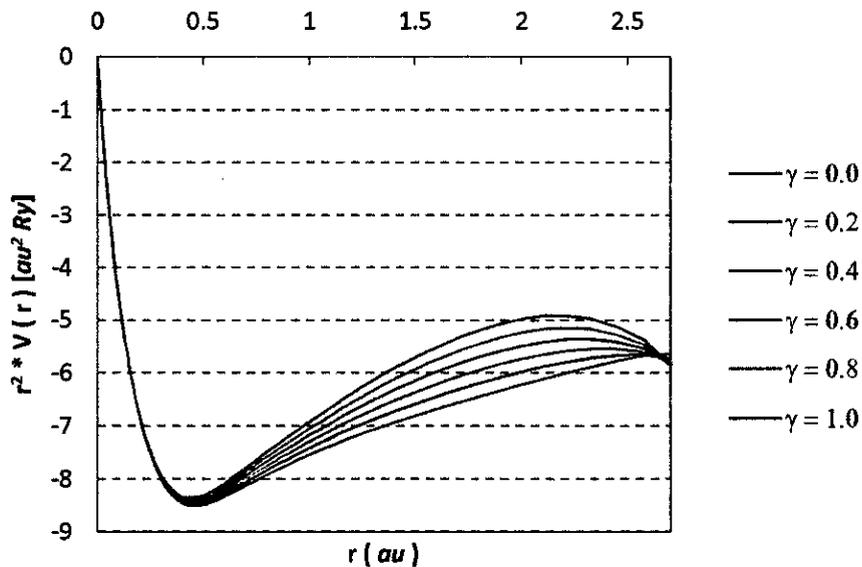
### 5.1 Resultados descriptivos

#### 5.1.1 El potencial efectivo del sólido

Con la carga electrónica del átomo libre que se obtuvo con el software libre ATOM.FOR (Dexclaus, 1969) se formuló y construyó la densidad de carga electrónica de los átomos de la red cristalina y con esta densidad se calculó el potencial de cada uno de los átomos en la red cristalina. Estos potenciales, necesarios para resolver la ecuación de Schrödinger, fueron calculados para diferentes porcentajes de la carga electrónica que residía fuera de las esferas atómicas transferidas a las esferas vacías de la red cristalina. Los resultados se muestran en las siguientes gráficas.

GRÁFICA N° 5.1

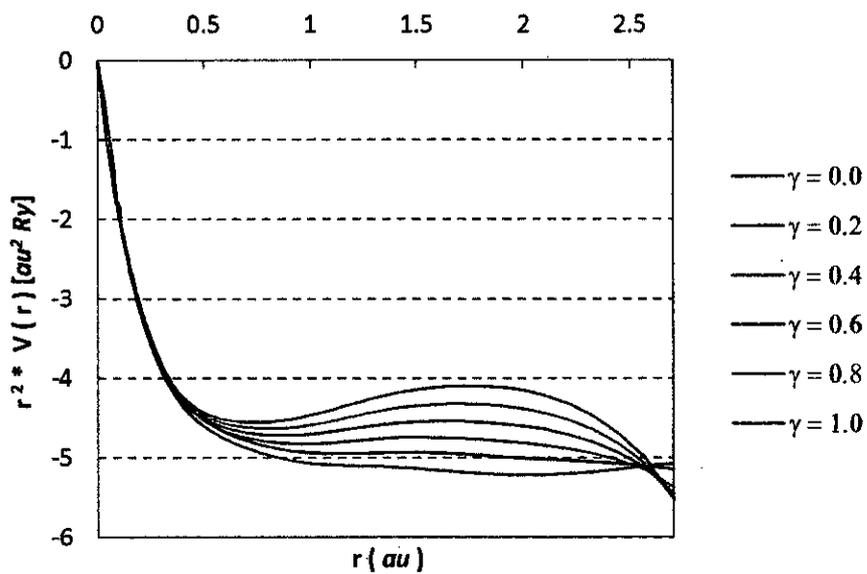
POTENCIAL DEL ARSENIO EN CRISTAL DE AlAr



*[Firma]*

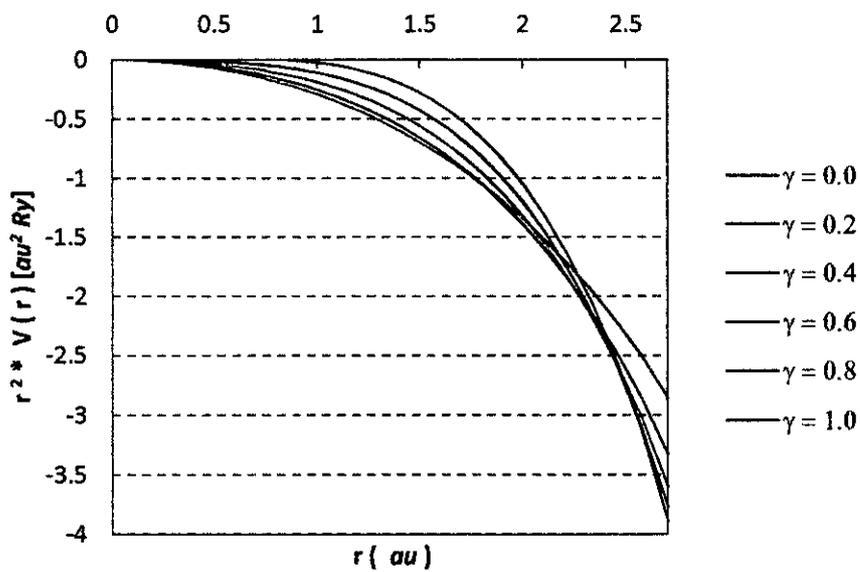
GRÁFICA N° 5.2

POTENCIAL DE ALUMINIO EN CRISTAL DE AlAr



GRÁFICA N° 5.3

POTENCIAL DE ESFERAS VACÍAS EN CRISTAL DE AlAs



### 5.1.2 Los parámetros potenciales LMTO

Conocido el potencial efectivo de la red cristalina, como siguiente paso usando los potenciales se resolvió la ecuación de Schrödinger del electrón en la red cristalina y fueron calculados los parámetros potenciales necesarios para formular los orbitales de la base LMTO. La Tabla 5.1 muestra los valores de los parámetros potenciales calculados considerando toda la carga electrónica que reside fuera de las esferas atómicas ( $\alpha = 0.0$ ) dentro de las esferas vacías en la red cristalina del sólido y considerando a las esferas vacías de la red cristalina sin ninguna ( $\alpha = 1.0$ ) de la carga electrónica que reside fuera de las esferas atómicas de la red.

TABLA N° 5.1  
PARÁMETROS POTENCIALES LMTO DEL AIAs

Parámetro $\gamma$	Parámetros Potenciales	Arsenio			Aluminio		
		s	p	d	s	p	d
$\gamma = 0.0$	$\epsilon_{\mu}$ (Ry)	-1.315	-0.290	1.387	0.679	0.199	1.256
	$Q_{\mu}$	0.403	0.085	0.032	0.415	0.089	0.024
	$C_{\mu}$ (Ry)	-1.315	-0.290	1.387	0.679	0.199	1.256
	$\Delta_{\mu}$ (Ry)	0.111	0.104	0.113	0.154	0.125	0.094
	$p_{\mu}$ (Ry <sup>2</sup> )	0.371	0.321	0.252	0.273	0.274	0.328
$\gamma = 1.0$	$\epsilon_{\mu}$ (Ry)	-0.963	0.050	1.707	-0.411	0.481	1.559
	$Q_{\mu}$	0.405	0.086	0.034	0.417	0.091	0.026
	$C_{\mu}$ (Ry)	-0.963	0.050	1.707	-0.411	0.481	1.559
	$\Delta_{\mu}$ (Ry)	0.125	0.115	0.122	0.168	0.137	0.104
	$p_{\mu}$ (Ry <sup>2</sup> )	0.343	0.299	0.237	0.251	0.257	0.302

Fuente: Elaboración propia

TABLA N° 5.2  
PARÁMETROS POTENCIALES LMTO DEL AIAs

Parámetro $\gamma$	Parámetros Potenciales	Esfera vacía 1			Esfera vacía 2		
		s	p	d	s	p	d
$\gamma = 0.0$	$\epsilon_{\mu}$ (Ry)	0.108	1.151	2.621	0.108	1.151	2.621
	$Q_{\mu}$	0.403	0.093	0.039	0.403	0.093	0.039
	$C_{\mu}$ (Ry)	0.108	1.151	2.621	0.108	1.151	2.621
	$\Delta_{\mu}$ (Ry)	0.160	0.154	0.151	0.160	0.154	0.151
	$p_{\mu}$ (Ry <sup>-2</sup> )	0.339	0.233	0.185	0.339	0.233	0.185
$\gamma = 1.0$	$\epsilon_{\mu}$ (Ry)	0.356	1.423	2.910	0.356	1.423	2.910
	$Q_{\mu}$	0.399	0.091	0.038	0.399	0.091	0.038
	$C_{\mu}$ (Ry)	0.356	1.423	2.910	0.356	1.423	2.910
	$\Delta_{\mu}$ (Ry)	0.144	0.144	0.144	0.144	0.144	0.144
	$p_{\mu}$ (Ry <sup>-2</sup> )	0.378	0.258	0.197	0.378	0.258	0.197

Fuente: Elaboración propia

### 5.1.3 Las bandas de energía del AIAs

Usando estos parámetros potenciales, ya calculados, se formuló la base de los orbitales LMTO y con estos se resolvió la ecuación de Schrödinger para el sólido cristalino y se determinó los auto-valores de energía (relación de dispersión) en las diferentes direcciones cristalográficas del alta simetría que presenta la red cristalina del AIAs, direcciones  $\Gamma - X$ ,  $\Gamma - L$  y  $\Gamma - K$ .

En las páginas siguientes se muestran los auto-valores de energía (véase la Tabla N° 5.3, la Tabla N° 5.4 y la Tabla N° 5.5, en las páginas 37, 38 y 39), obtenidas con  $\gamma = 0.0$  y las correspondientes bandas de energía asociada a estas. Todos los auto-valores calculados en unidades de energía Rydberg (1.0 Ry).



TABLA N° 5.3

AUTO-VALORES DE LAS BANDAS DE ENERGÍA DE AIAs

Auto-valores de energía con $\gamma = 0.0$ , dirección $\Gamma - L$							
k(1,1,1)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
-1.000	-1.092	-0.638	-0.330	-0.050	0.178	0.435	0.721
-0.950	-1.093	-0.636	-0.330	-0.049	0.178	0.435	0.709
-0.900	-1.095	-0.631	-0.329	-0.048	0.178	0.432	0.684
-0.850	-1.099	-0.623	-0.328	-0.046	0.179	0.428	0.655
-0.800	-1.103	-0.612	-0.327	-0.044	0.179	0.420	0.626
-0.750	-1.109	-0.599	-0.325	-0.041	0.180	0.407	0.599
-0.700	-1.115	-0.583	-0.322	-0.037	0.180	0.390	0.575
-0.650	-1.122	-0.564	-0.320	-0.032	0.179	0.368	0.555
-0.600	-1.129	-0.544	-0.317	-0.028	0.178	0.341	0.538
-0.550	-1.135	-0.522	-0.313	-0.023	0.175	0.312	0.526
-0.500	-1.142	-0.499	-0.310	-0.018	0.170	0.282	0.519
-0.450	-1.149	-0.475	-0.306	-0.013	0.165	0.251	0.516
-0.400	-1.155	-0.449	-0.303	-0.010	0.158	0.221	0.518
-0.350	-1.161	-0.423	-0.299	-0.009	0.151	0.192	0.524
-0.300	-1.166	-0.397	-0.295	-0.011	0.144	0.168	0.534
-0.250	-1.170	-0.370	-0.292	-0.017	0.137	0.148	0.547
-0.200	-1.174	-0.345	-0.289	-0.027	0.130	0.133	0.562
-0.150	-1.177	-0.322	-0.287	-0.041	0.124	0.125	0.579
-0.100	-1.179	-0.302	-0.285	-0.055	0.120	0.120	0.595
-0.050	-1.180	-0.289	-0.284	-0.065	0.117	0.118	0.608
0.000	-1.181	-0.284	-0.284	-0.069	0.117	0.117	0.613

Fuente: Elaboración propia

TABLA N° 5.4  
 AUTO-VALORES DE LAS BANDAS DE ENERGÍA DE AIAS

Auto-valores de energía con $\gamma = 0.0$ , dirección $\Gamma - X$							
$k(0,1,0)$	$e(R\gamma)$						
0.000	-1.181	-0.284	-0.284	-0.069	0.117	0.117	0.613
0.050	-1.180	-0.289	-0.285	-0.064	0.115	0.119	0.599
0.100	-1.178	-0.304	-0.288	-0.049	0.111	0.126	0.566
0.150	-1.176	-0.324	-0.293	-0.029	0.104	0.137	0.528
0.200	-1.172	-0.348	-0.300	-0.007	0.097	0.153	0.489
0.250	-1.167	-0.374	-0.308	0.012	0.092	0.171	0.454
0.300	-1.161	-0.400	-0.316	0.023	0.091	0.192	0.425
0.350	-1.154	-0.426	-0.325	0.023	0.097	0.216	0.404
0.400	-1.146	-0.452	-0.334	0.016	0.102	0.241	0.394
0.450	-1.138	-0.477	-0.343	0.006	0.102	0.268	0.397
0.500	-1.129	-0.500	-0.351	-0.005	0.094	0.296	0.412
0.550	-1.120	-0.523	-0.359	-0.016	0.080	0.324	0.438
0.600	-1.110	-0.544	-0.367	-0.026	0.063	0.353	0.470
0.650	-1.101	-0.564	-0.373	-0.035	0.045	0.382	0.506
0.700	-1.092	-0.582	-0.379	-0.043	0.027	0.410	0.546
0.750	-1.083	-0.598	-0.384	-0.049	0.009	0.438	0.586
0.800	-1.076	-0.611	-0.388	-0.053	-0.006	0.465	0.626
0.850	-1.069	-0.622	-0.391	-0.055	-0.020	0.489	0.663
0.900	-1.064	-0.630	-0.393	-0.055	-0.031	0.510	0.695
0.950	-1.061	-0.635	-0.395	-0.052	-0.041	0.525	0.713
1.000	-1.060	-0.637	-0.395	-0.048	-0.047	0.531	0.707

Fuente: Elaboración propia



TABLA N° 5.5  
 AUTO-VALORES DE LAS BANDAS DE ENERGÍA DE AIAS

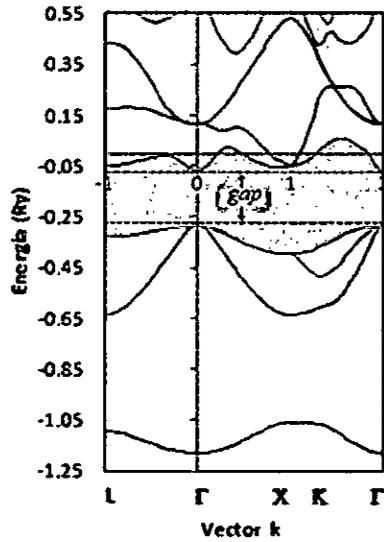
Auto-valores de energía con $\gamma = 0.0$ , dirección $\Gamma - K$							
k(1,1,0)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
1.000	-1.060	-0.637	-0.395	-0.395	-0.048	-0.047	0.531
1.050	-1.060	-0.636	-0.402	-0.395	-0.046	-0.036	0.524
1.100	-1.060	-0.633	-0.418	-0.392	-0.041	-0.006	0.506
1.150	-1.060	-0.629	-0.439	-0.389	-0.033	0.039	0.479
1.200	-1.061	-0.624	-0.459	-0.383	-0.022	0.094	0.446
1.250	-1.063	-0.618	-0.474	-0.377	-0.009	0.152	0.410
1.300	-1.066	-0.613	-0.482	-0.369	0.006	0.207	0.372
1.350	-1.070	-0.607	-0.483	-0.361	0.021	0.246	0.336
1.400	-1.077	-0.601	-0.475	-0.352	0.036	0.261	0.302
1.450	-1.086	-0.592	-0.462	-0.342	0.049	0.260	0.271
1.500	-1.096	-0.578	-0.444	-0.332	0.057	0.242	0.244
1.550	-1.107	-0.560	-0.424	-0.323	0.059	0.217	0.218
1.600	-1.119	-0.537	-0.402	-0.314	0.056	0.194	0.195
1.650	-1.132	-0.509	-0.379	-0.306	0.048	0.173	0.176
1.700	-1.143	-0.476	-0.357	-0.300	0.038	0.155	0.160
1.750	-1.154	-0.441	-0.337	-0.294	0.025	0.141	0.147
1.800	-1.163	-0.402	-0.319	-0.290	0.010	0.130	0.136
1.850	-1.171	-0.363	-0.304	-0.287	-0.011	0.123	0.127
1.900	-1.176	-0.326	-0.293	-0.285	-0.036	0.119	0.122
1.950	-1.180	-0.296	-0.286	-0.284	-0.059	0.117	0.118
2.000	-1.181	-0.284	-0.284	-0.284	-0.069	0.117	0.117

Fuente: Elaboración propia



GRÁFICA N° 5.4

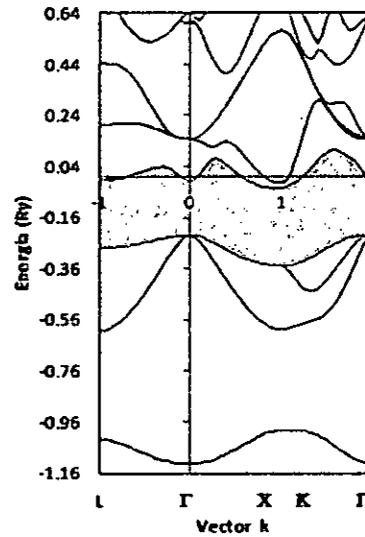
BANDAS DE ENERGÍA,  $\gamma = 0.0$



Fuente: Elaboración propia.

GRÁFICA N° 5.5

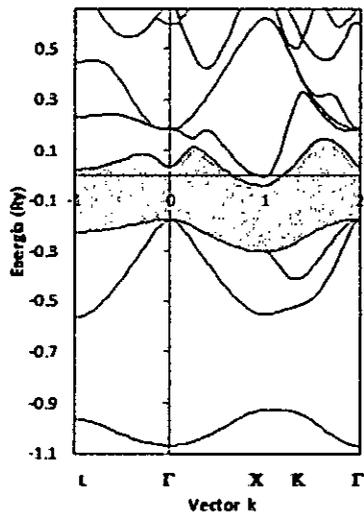
BANDAS DE ENERGÍA  $\gamma = 0.2$



Fuente: Elaboración propia.

GRÁFICA N° 5.6

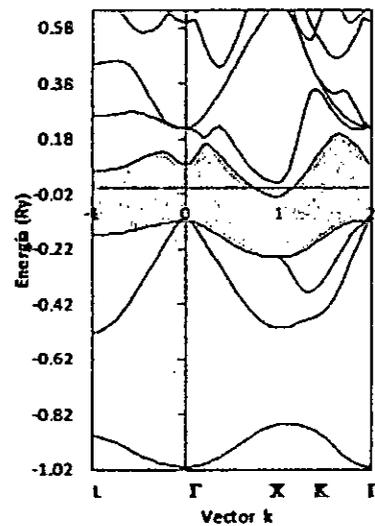
BANDAS DE ENERGÍA,  $\gamma = 0.4$



Fuente: Elaboración propia.

GRÁFICA N° 5.7

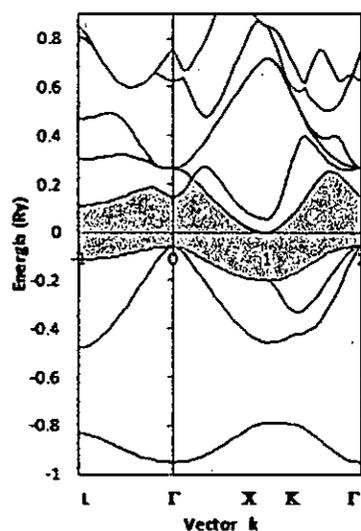
BANDAS DE ENERGÍA  $\gamma = 0.6$



Fuente: Elaboración propia.

GRÁFICA N° 5.8

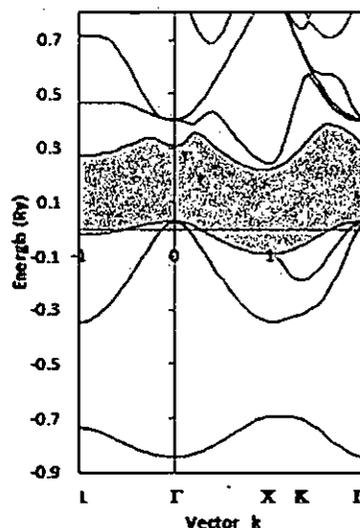
BANDAS DE ENERGÍA,  $\gamma = 0.8$



Fuente: Elaboración propia.

GRÁFICA N° 5.9

BANDAS DE ENERGÍA  $\gamma = 1.0$



Fuente: Elaboración propia.

La brecha de energía prohibida (*gap*) que se obtuvo en los resultados de las bandas de energía se ilustra con las líneas discontinuas entre las bandas de valencia, debajo de la región sombreada, y las bandas de conducción, encima de la región sombreada en la gráfica N° 5.4 (véase página 40), con un valor de 0.214 Ry o de 2.91 eV para un valor de  $\gamma = 0.0$ .

#### 5.1.4 La densidad de estados DOS

En la página siguiente se muestran la densidad de estados ocupados DOS correspondientes a las bandas de energía obtenidas con  $\gamma = 0.0$  (véase la gráfica N° 5.4, en la página 41). Todos los auto-valores expresados en unidades de energía atómica Rydberg (1.0 Ry).

TABLA N° 5.6  
DENSIDAD DE ESTADOS PARA SÓLIDO DE AIAs

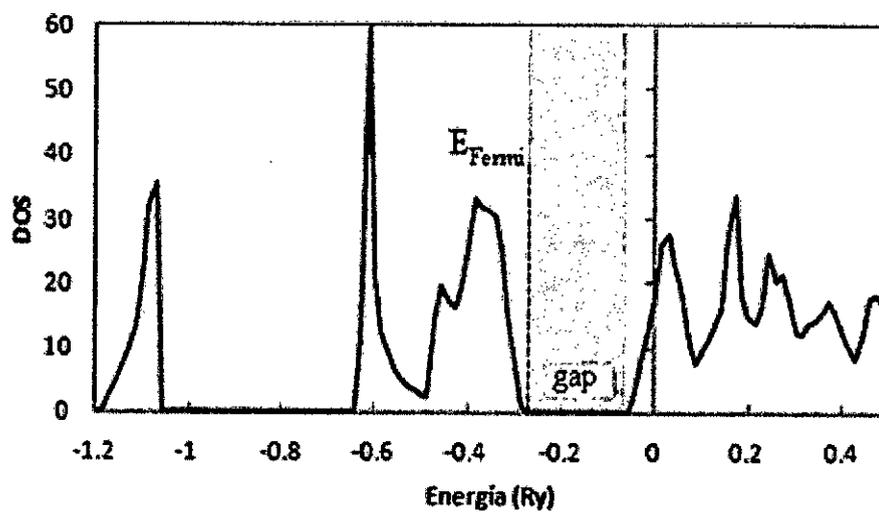
valores de la densidad de estados DOS, obtenido con $\gamma = 0.0$							
e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)
-1.200	0.000	-0.843	0.000	-0.486	2.510	-0.129	0.000
-1.186	0.000	-0.829	0.000	-0.471	14.728	-0.114	0.000
-1.171	2.488	-0.814	0.000	-0.457	19.600	-0.100	0.000
-1.157	4.908	-0.800	0.000	-0.443	17.546	-0.086	0.000
-1.143	7.124	-0.786	0.000	-0.429	16.078	-0.071	0.000
-1.129	9.763	-0.771	0.000	-0.414	19.350	-0.057	0.049
-1.114	13.458	-0.757	0.000	-0.400	24.726	-0.043	3.149
-1.100	20.638	-0.743	0.000	-0.386	33.203	-0.029	7.983
-1.086	32.065	-0.729	0.000	-0.371	31.835	-0.014	12.960
-1.071	35.567	-0.714	0.000	-0.357	31.491	0.000	17.846
-1.057	0.000	-0.700	0.000	-0.343	30.464	0.014	26.041
-1.043	0.000	-0.686	0.000	-0.329	25.279	0.029	27.813
-1.029	0.000	-0.671	0.000	-0.314	14.842	0.043	22.389
-1.014	0.000	-0.657	0.000	-0.300	8.854	0.057	18.793
-1.000	0.000	-0.643	0.000	-0.286	0.750	0.071	10.985
-0.986	0.000	-0.629	11.677	-0.271	0.000	0.086	7.669
-0.971	0.000	-0.614	59.678	-0.257	0.000	0.100	9.332
-0.957	0.000	-0.600	20.876	-0.243	0.000	0.114	11.154
-0.943	0.000	-0.586	12.476	-0.229	0.000	0.129	13.819
-0.929	0.000	-0.571	8.824	-0.214	0.000	0.143	16.017
-0.914	0.000	-0.557	6.497	-0.200	0.000	0.157	27.527
-0.900	0.000	-0.543	5.295	-0.186	0.000	0.171	33.651
-0.886	0.000	-0.529	4.336	-0.171	0.000	0.186	17.861
-0.871	0.000	-0.514	3.554	-0.157	0.000	0.200	14.876
-0.857	0.000	-0.500	2.941	-0.143	0.000	0.214	13.730

Fuente: Elaboración propia



GRÁFICA N° 5.10

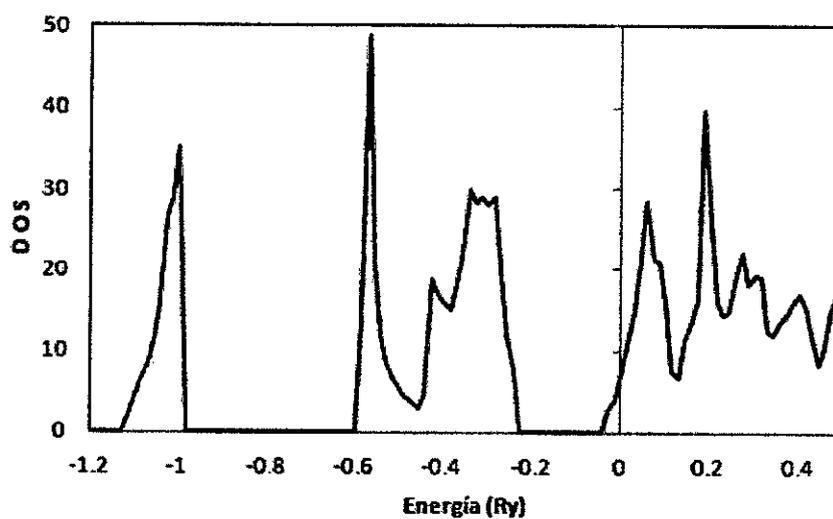
LA DENSIDAD DE ESTADOS DE AIAs,  $\gamma = 0.0$



Fuente: Elaboración propia

GRÁFICA N° 5.11

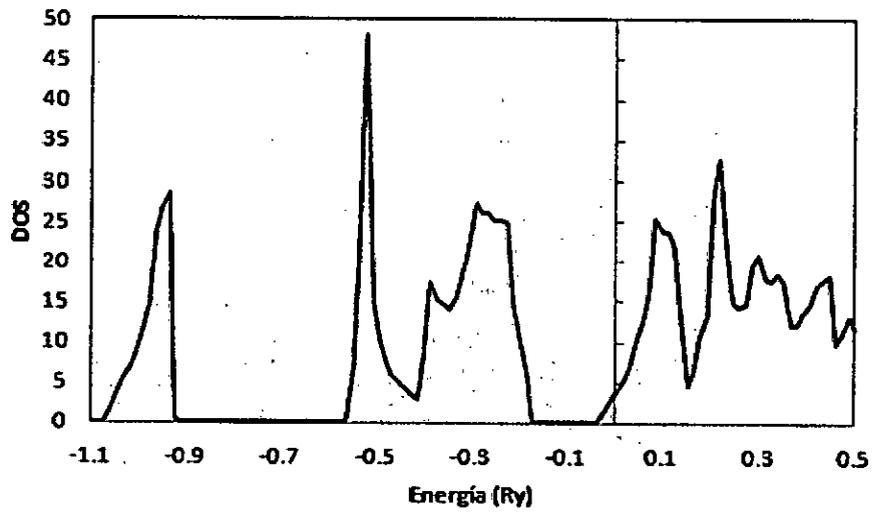
LA DENSIDAD DE ESTADOS DE AIAs,  $\gamma = 0.2$



Fuente: Elaboración propia

GRÁFICA N° 5.12

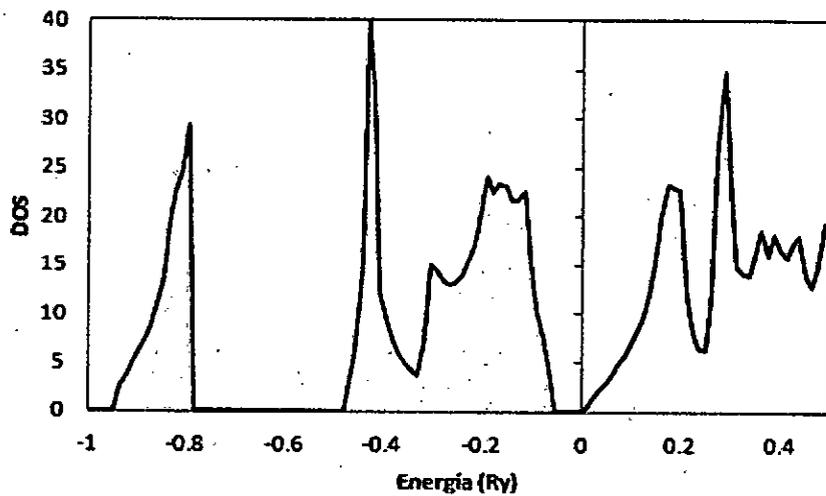
LA DENSIDAD DE ESTADOS DE AIA<sub>s</sub>,  $\gamma = 0.4$



Fuente: Elaboración propia

GRÁFICA N° 5.13

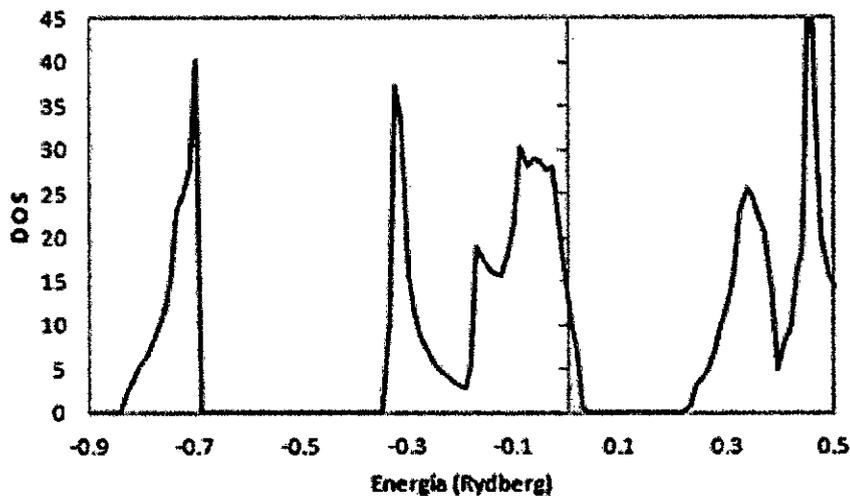
LA DENSIDAD DE ESTADOS DE AIA<sub>s</sub>,  $\gamma = 0.8$



Fuente: Elaboración propia

GRÁFICA N° 5.14

LA DENSIDAD DE ESTADOS DE AIAs,  $\gamma = 1.0$



Fuente: Elaboración propia

La densidad de estados DOS para este cristal de AIAs calculada con  $\gamma = 0.0$ , resulto con una densidad de estados nula entre -0.275 Ry y -0.06 Ry, una brecha de energía de 2.91 eV, brecha de energía prohibida (gap) entre los estados de valencia de color amarillo y los estados de conducción de color blanco. La región sombreada de gris en la densidad de estados DOS del AIAs (véase la gráfica 5.9, en la página 43), ilustra la brecha de energía prohibida.

### 5.1.5 La energía total del sólido de AIAs

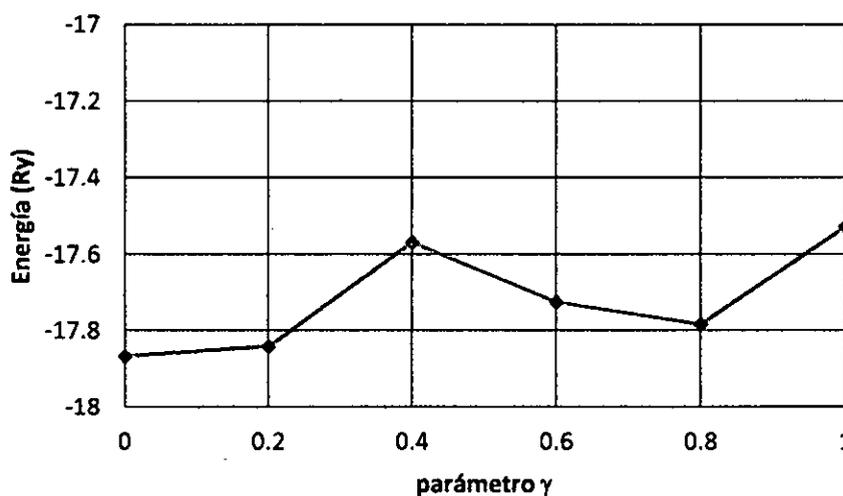
Usando los resultados de la densidad de estados y la densidad de carga electrónica del sólido cristalino se efectuó el cálculo de la energía total y de la energía de Fermi del sólido cristalino. En la siguiente página se muestra los valores obtenidos para diferentes valores de transferencia de carga a las esferas vacías en la red cristalina.

TABLA N° 5.7  
ENERGÍA TOTAL DEL SÓLIDO CRISTALINO AIAS.

Valores de la energía total $E_T$ y energía de Fermi $E_F$						
$\gamma$	0.00	0.20	0.40	0.60	0.80	1.00
$E_g$ (Ry)	0.214	0.171	0.134	0.078	0.05	0.176
$E_T$ (Ry)	-17.87	-17.84	-17.57	-17.72	-17.78	-17.53
$E_F$ (Ry)	-0.27	-0.23	-0.17	-0.11	-0.05	0.04

Fuente: elaboración propia.

GRÁFICA N° 5.15  
ENERGÍA TOTAL DEL COMPUESTO DE AIAs



Fuente: Elaboración propia.

### 5.2 Resultados inferenciales

Ninguna, la presente investigación es teórica básica.

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

Ninguna.

## CAPÍTULO VI: DISCUSIÓN DE RESULTADOS

### 6.1 Contrastación de hipótesis

#### 6.1.1 La estructura electrónica del AlAs.

Para este compuesto cristalino de AlAs los auto-valores de las bandas de energía que fueron calculadas para los diferentes valores de  $\gamma$  y en las direcciones cristalográficas de alta simetría, las direcciones:  $\Gamma - L$ ,  $\Gamma - X$  y  $\Gamma - K$ , presentaron una brecha de energía prohibida quedando demostrada la hipótesis acerca del problema de la investigación.

La estructura de las bandas de energía calculadas para el caso de  $\gamma = 0.0$  y en las direcciones cristalográficas de alta simetría, se presentan en la Tabla N° 5.3, la Tabla N° 5.4 y la Tabla N° 5.5 (véase las páginas 37, 38 y 39), como se puede apreciar en la estructura de las bandas de energía (véase la gráfica N° 5.1, en la página 40) entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción en el punto  $\Gamma$ , existe una brecha prohibida de 0.214 Ry ó 2.91 eV, sin embargo las bandas de energía calculadas para los demás valores de  $\gamma$  dieron resultados con menores valores de la energía prohibida: de 0.171 Ry ó 2.33 eV para  $\gamma = 0.2$ ; de 0.134 Ry ó 1.82 eV para  $\gamma = 0.4$ , de 0.078 Ry ó 1.06 eV para  $\gamma = 0.6$ , de 0.050 Ry ó 0.68 eV para  $\gamma = 0.8$  y de 0.176 Ry ó 2.40 eV para  $\gamma = 1.0$ .

#### 6.1.2 La densidad de estados

La densidad de estados ocupados calculados para un valor de  $\gamma = 0.0$  resultaron con un perfil que confirma la brecha de energía prohibida de 0.214 Ry ó 2.91 eV, mostrando el carácter semiconductor de este sólido cristalino. Por otro lado los resultados del perfil de la densidad de estados calculados para los otros valores  $\gamma$ , la transferencia de carga electrónica a las esferas vacías de la red cristalina, confirmaron una brecha de energía prohibida de menor valor, como lo obtenido en



la estructura de las bandas de energía.

### 6.1.3 La energía total del AIAs

Los resultados de la energía total calculada para este sólido cristalino resultaron con una energía mínima de  $-17.87$  Ry para  $\gamma = 0.0$  (véase la gráfica N° 5.12, en la página 46), el caso en que toda la carga electrónica fuera de las esferas atómicas fueron transferidas a las esferas vacías de la red cristalina. Justamente para este valor de  $\gamma = 0.0$  las bandas de energía y la densidad de estados resultaron con una máxima brecha prohibida de energía de  $0.214$  Ry ó  $2.91$  eV de magnitud, lo que significa una mayor estabilidad del sólido cristalino para este valor de la energía total. Los resultados de la energía total obtenidas para los otros valores de  $\gamma$ , resultaron de mayor magnitud con una bandas de energía y densidad de estados asociadas con una menor brecha de energía prohibida. Para el caso opuesto en que toda la carga electrónica fuera de las esferas atómicas residen dentro de su propia esfera atómica,  $\gamma = 1.0$ , se obtuvo una energía de  $-17.53$  Ry con una densidad de estados y unas bandas de energía con brecha de energía prohibida de  $2.4$  eV.

### 6.2 Contrastación de hipótesis con estudios similares

Para el caso de la estructura electrónica (las bandas de energía y la DOS) la brecha prohibida de energía de  $0.214$  Ry ó  $2.91$  eV difiere en  $5.7\%$  de valor teórico obtenido por Wang, (Wang, 2013), usando el modelo de la energía de intercambio semi-local modificada de Becke-Johson. El resultado obtenido para la brecha de energía prohibida en la presente investigación diferente en  $6.0\%$  respecto del valor experimental reportado (Vurgaftman, et al., 2001).

### 6.3 Responsabilidad ética

Esta investigación ha obtenido resultados propios del AIAs, respetando los derechos de autoría y se usó software libre para efectuar algunos cálculos.



## CONCLUSIONES

- a) Los mejores resultados calculados para la estructura de las bandas de energía del AlAs, se obtuvo cuando el 100% de aquella pequeña fracción de la carga electrónica fuera de las esferas atómicas fue transferida a las esferas vacías de la red cristalina ( $\gamma = 0.0$ ). La estructura de las bandas de energía resultó con un perfil similar y con una energía prohibida de 0.214 Ry ó 2.91 eV que se ajusta bien a los resultados con otros métodos y técnicas reportados.
- b) La mejor densidad de estados fue la que se calculó con  $\gamma = 0.0$ , ésta DOS confirmó la brecha de energía prohibida que fue obtenida en las bandas de energía asociada.
- c) La energía total asociada a la mejor estructura electrónica, densidad de estados y bandas de energía, calculada con  $\gamma = 0.0$  resultó de -17.87 Ry de valor mínimo frente a los otros resultados obtenidos.
- d) Finalmente se concluye que el método LMTO fue el método apropiado para resolver la ecuación de Schrödinger del sólido cristalino y determinar teóricamente la estructura electrónica del AlAs.

## RECOMENDACIONES

Se puede decir que el método de los orbitales lineales Muffin-tin o LMTO es recomendable para un estudio teórico de la estructura electrónica de sólidos cristalinos porque resulta ser eficiente, práctico y de bajo costo económico, puesto que se requiere de una computadora personal, de un compilador fortran y del software de cálculo sobre el LMTO que ya existe como software libre.



## REFERENCIAS

- Amador, C., 1991. Sumas de Madelung. *Revista Mexicana de Física*, 37(2), pp. 331 - 345.
- Andersen, O. K., 1975. Electronic structure and physical properties of solids. *Physical Review B*, Volumen 12, p. 3060.
- Andersen, O. K. & Jepsen, O., 1994. *Lectures in methods of electronic structure calculation*. Singapore, World Sci. Publ. Co..
- Bautista-Hernández, A., 2003. Estudio estructural de los semiconductores AlP, GaAs, AlAs con estructura wurzita. *Revista Mexicana de Física*, 49(1), pp. 9 -14.
- Cabrera Arista, C., 2018. *Proyecto de Investigación: Estructura electrónica y energía prohibida en la aleación cristalina de Aluminio-Arsenio AlAs*. Bellavista, Callao: UI-FIQ VRI-UNAC.
- Ceperley, D. M. & Alder, B. J., 1980. Parametrised local spin density exchange-correlation energies. *Physical Review letter* , Volumen 45, p. 566.
- Cohen, M. L. & helikowsky, , J. R., 1988. *Electronic sttructure and optical properties of semiconductors*. 2 ed. New York: Springer Verlag New York Berlin Heidelberg.
- Dexclaus, J. P., 1969. *Atom.for*. Paris: CEA.
- Eyert, V., 2008. *Electronic structure of crystalline materials*. Augsburg: Institut für Physics, universität Augsburg.
- Hohember, P. & Kohn, W., 1964. Local spin density theory. *Physical Review B*, 136(2), p. 864.
- Jackson, J. D., 1980. *Electrodinamica clasica*. 2da. ed. Madrid, España: Alambra S. A..
- Jivani, A. R., 2005. Total energy, equation of states and bulk modulus of AlP, AlAs and AlSb semiconductors. *Indian Academy of Sciences, Pramana Juornal Physics*, 64(1), pp. 153-158.
- Klahold, W. M., 2017. High resolution optical spectroscopy of free exciton and electronic band structure Near the fundamental gap in 4H-SiC. *Material Sciencie Forum*, Volumen 924, pp. 234-244.



- Kohn, W., 1999. Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, 71(5), pp. 1253 - 1266.
- Kohn, W. & Sham, L. J., 1965. Self consistent equation including exchange and correlations effects. *Physical Review*, 140(4A), p. 1133.
- Nowak, H. J., 1991. Electronic structure calculations for amorphous solids using the recursion method and linear muffin-tin orbitals. *Physical Review B*, 44(8), pp. 3577-3579.
- Perdew, J. P., 2003. Density functional non relativistic coulomb systems in the new century. En: F. N. M. M. C. Fiolhais, ed. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 1-55.
- Remediakis, I. N., 1999. Band Structure calculations for semiconductors within generalized density functional theory. *Physical Review B*, 59(8), pp. 5536-5543.
- Skriver, H. L., 1984. *The LMTO method: muffin-tin orbitals and electronic structure*. 1 ed. Berlin: Springer-Verlag.
- Vurgaftman, I., Meyer, J. R. & Ram-Mohan, L. R., 2001. *Journal Applied Physics*, Volumen 89, p. 5815.
- Wang, Y., 2013. Electronic structure of III-V zinc-blende semiconductors from first principles. *Physics Review B*, 87(23), p. 235203.
- Wang, Z., 2009. *First-principle electronic structure theory, graphene calculations*, Amsterdam: Faculteit der Natuurwetenschappen U.A. .
- Zheng, J.-C., 2001. Trends in bonding configuration at SiC/III-V semiconductor interfaces. *Applied Physics Letters*, 79(11), pp. 1643 - 1645.
- Zwierzycy, M. a. A. O. K., 2009. The overlapping muffin-tin approximation. *Acta Physica Polonica A*, 115(1), pp. 64-68.



## ANEXOS

### Equivalencias de sistemas de unidades

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

$$1.0 \text{ eV} = 1.0 \text{ electr3n-Volt} = 1.60219 \times 10^{-19} \text{ J (Unidad de energ3a at3mica)}$$

$$1.0 \text{ Ry} = 1.0 \text{ Rydberg} = 13.6058 \text{ eV (Unidad de energ3a at3mica)}$$

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

$$e^+ = e^- = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C (Carga del prot3n o del electr3n)}$$

$$m_e = 9.1096 \times 10^{-31} \text{ kg (Masa del electr3n)}$$

### Siglas usadas

*a.u.* = *atomic unit*: unidad at3mica de distancia

AlAs = S3mbolo de aleaci3n binaria de Aluminio-Arsenio

*Zinblende* = red cristalina tipo blenda de cinc 3 ZnS.

DFT = *Density Functional Theory*

LMTO = *Linear Muffin-Tin Orbitals*

DOS = *Density occupied states*

LDA = *Local density approximation*

ASA = *atomic sphere approximation*

FCC = *Face center cubic*

$\psi_\alpha$  = funci3n de onda de orbital at3mico con n3mero cu3ntico  $\alpha$

$\varepsilon_\alpha$  = auto-valor de energ3a (en *a.u.*) del orbital con n3mero cu3ntico  $\alpha$

