

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN



INFORME FINAL DE INVESTIGACIÓN

“TRANSICIÓN DE FASE SEMICONDUCTORA A
FERROMAGNÉTICA EN ALEACIÓN HIERRO-ARSÉNICO
FeAs CON RED CRISTALINA BLENDA DE CINCO”

AUTOR: Mg. CÉSAR CABRERA ARISTA

PERÍODO DE EJECUCIÓN: 01 de abril del 2023 al 31 de marzo del 2024

RESOLUCIÓN: 250-2023-R

Callao, 2024

PERU

INFORMACIÓN BÁSICA

FACULTAD:

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN:

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN DE ING. QUÍMICA

TÍTULO:

TRANSICIÓN DE FASE SEMICONDUCTORA A FERROMAGNÉTICA EN ALEACIÓN
HIERRO-ARSÉNICO FeAs CON RED CRISTALINA BLENDA DE CINC.

AUTOR:

Mg. Lic. CÉSAR CABRERA ARISTA

CODIGO ORCID:

0000-0003-2612-6560

DNI:

09650209

LUGAR DE EJECUCIÓN:

LAB. DE QUÍMICA FIQ-UNAC

UNIDAD DE ANÁLISIS:

ALEACIÓN HIERRO-ARSÉNICO FeAs CON RED CRISTALINA BLENDA DE CINC

TIPO:

INVESTIGACIÓN BÁSICA Y TEÓRICA.

TEMA OCDE:

FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA 1.03.02

DEDICATORIA

Dedicado a mi esposa Lina Haydee, a quien
Dios bendiga e ilumine siempre.

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

AGRADECIMIENTO

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

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

ÍNDICE

	Página
ÍNDICE	1
TABLAS DE CONENIDO	4
Índices de Figuras	4
Índices de Tablas	5
RESUMEN	6
ABSTRAC	7
INTRODUCCIÓN	8
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	10
1.1 Descripción de la realidad problemática	10
1.2 Formulación del problema.	12
1.2.1 Problema general	12
1.2.2 Problemas específicos	12
1.3 Objetivos:	13
1.3.1 Objetivo general	13
1.3.2 Objetivos específicos	13
1.4 Limitantes de la investigación	13
1.4.1 Teórico	13
1.4.2 Temporal	14
1.4.3 Espacial	14
II. MARCO TEÓRICO	15
2.1 Antecedentes	15
2.1.1 Antecedentes internacionales	15
2.1.2 Antecedente nacional	16
2.2 Marco	17
2.2.1 Formalismo teórico del funcional de la densidad	17
2.2.2 El potencial efectivo en la red cristalina	20
2.2.3 La densidad de carga electrónica en la red cristalina	24

	Páginas
2.2.4 La energía total de sistema	27
2.2.5 El método LMTO	28
2.3 Marco conceptual	33
2.3.1 Estructura electrónica calculada con ondas planas	33
2.4 Definición de términos básicos	36
III. HIPÓTESIS Y VARIABLES	38
3.1 Hipótesis	38
Hipótesis general	38
Hipótesis específica	38
3.2 Definición operacional de variables	38
3.3 Operacionalización de variables	39
IV. DISEÑO METODOLOGICO	40
4.1 Tipo y diseño de la investigación.	40
4.1.1 Tipo	40
4.1.2 Diseño	40
4.2 Método de investigación	41
4.3 Población y muestra.	41
4.4 Lugar de estudio y período de desarrollo	41
4.5 Técnicas e instrumentos para recolección de información	41
4.6 Análisis y procesamiento de datos.	41
V. RESULTADOS	42
5.1 Resultados descriptivos	42
5.1.1 El potencial efectivo de la red cristalina	42
5.1.2 Los parámetros potenciales LMTO	44
5.1.3 Las bandas de energía del FeAs	45
5.1.4 La densidad de estados del FeAs	54
5.1.5 La energía total de la aleación de FeAs	57
5.2 Resultados inferenciales	57



	Páginas
5.3 Otro tipo de resultados según naturaleza de la hipótesis	57
VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS	58
6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	58
6.2 Contrastación de resultados con otros estudios similares	59
6.3 Responsabilidad ética	60
CONCLUSIONES	61
RECOMENDACIONES	62
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63
ANEXOS	66
Unidades y equivalencias usadas	66
Siglas usadas	66
Matriz de consistencia	67

TABLAS DE CONTENIDO

	Página
Índice de Figuras	
Figura 1: Estructura blanda de cinc de aleación FeAs	22
Figura 2: Densidad de carga electrónica de valencia en Fe	25
Figura 3: Densidad de carga electrónica de valencia en As	25
Figura 4: Carga electrónica de la coraza en átomo libre de As	26
Figura 5: Potencial efectivo del átomo de arsénico en la red FeAs	42
Figura 6: Potencial efectivo del átomo de hierro en la red FeAs	43
Figura 7: Potencial efectivo de esferas vacías en la red del FeAs	43
Figura 8: Bandas de energía del FeAs, $\gamma = 0.0$	52
Figura 9: Bandas de energía del FeAs, $\gamma = 0.3$	52
Figura 10: Bandas de energía del FeAs, $\gamma = 0.6$	53
Figura 11: Bandas de energía del FeAs, $\gamma = 1.0$	53
Figura 12: Densidad de estados en fase semiconductor del FeAs, $\gamma = 0.0$	56
Figura 13: Densidad de estados en fase ferromagnética del FeAs, $\gamma = 0.3$	56
Figura 14: Energía total de aleación FeAs, en Rydberg.	57

	Página
Índice de Tablas	
Tabla 1: Operacionalización de variables	39
Tabla 2: Parámetros potenciales LMTO de esferas atómica en la red FeAs	44
Tabla 3: Parámetros potenciales de esferas vacías en la red del FeAs	45
Tabla 4: Bandas de energía en fase semiconductor del FeAs, dirección Γ -L	46
Tabla 5: Bandas de energía en fase semiconductor del FeAs, dirección Γ -X.	47
Tabla 6: Bandas de energía en fase semiconductor del FeAs, dirección Γ -K.	48
Tabla 7: Bandas de energía en fase ferromagnética del FeAs, dirección Γ -L	49
Tabla 8: Bandas de energía en fase ferromagnética del FeAs, dirección Γ -X.	50
Tabla 9: Bandas de energía en fase ferromagnética del FeAs, dirección Γ -K.	51
Tabla 10: La densidad de estados en fase semiconductor, en aleación de FeAs.	54
Tabla 11: La densidad de estados en fase ferromagnética, en aleación de FeAs.	55
Tabla 12: Energía total en aleación cristalina de FeAs	57

RESUMEN

Este trabajo se demuestra la posible transición de una fase semiconductor a ferromagnética en la aleación de hierro-arsénico FeAs con red cristalina tipo blenda de cinc. Se efectuó un estudio de la estructura electrónica y de la energía total de esta aleación FeAs para diferentes valores de la fracción pequeña q_R de la carga electrónica de valencia fuera de su esfera atómica, residiendo en las esferas de las regiones vacías de la red cristalina. Para el 100% de toda la carga electrónica q_R residiendo en las esferas vacías se obtuvo una estructura de bandas de energía con brecha de energía prohibida indirecta de 0.248Ry ó 3.378eV en la dirección Γ -X de alta simetría de la red. Estructura electrónica asociada a una fase semiconductor del FeAs con energía total de -17.57Ry. Mientras que para el 70% de la carga electrónica q_R residiendo en las esferas vacías se obtuvo una estructura de bandas de energía y densidad de estados sin brecha de energía prohibida, con gran concentración de estados electrónicos entre la banda de valencia y de conducción. Estructura electrónica asociada a una fase ferromagnética de la aleación FeAs con energía total mínima de -19.68Ry. Fue considerado una red blenda de cinc llena de esferas atómicas de tamaño diferente que preservan la densidad del material y la simetría de la red. Aquí fue empleado el método de los orbitales lineales muffins tin (LMTO) (Andersen et al., 2007) para resolver la ecuación de Schrödinger de la red cristalina del FeAs. Se empleó un potencial efectivo LDA usado para el cálculo de la estructura electrónica del AlAs (Cabrera, 2020) formulado con base en la teoría del funcional de la densidad (DFT) (Kohn et al., 1996), formalismo que permite usar la formulación de McLaren (MacLaren et al., 1991) para los términos de intercambio y de correlación en el potencial efectivo.

Palabras claves: bandas de energía, semiconductores, ferromagnetismo



ABSTRACT

This work demonstrates the possible transition from a semiconductor to a ferromagnetic phase in the iron-arsenic alloy FeAs with zinc blende-like crystal lattice. A study of the electron structure and total energy of this FeAs alloy was carried out for different values of the small fraction q_R of the valence electron charge outside its atomic sphere, residing in the spheres of the empty regions of the crystal lattice. For 100% of all the electronic charge q_R residing in the empty spheres, an energy band structure with an indirect energy-forbidden gap of 0.248 Ry or 3.378 eV was obtained in the Γ -X direction of high symmetry of the network. Electronic structure associated with a semiconductor phase of FeAs with a total energy of -17.57 Ry. On the other hand, for 70% of the electronic charge q_R residing in the empty spheres, a structure of energy bands and density of states was obtained without a forbidden energy gap, with a high concentration of electronic states between the valence and conduction bands. Electronic structure associated with a ferromagnetic phase of the FeAs alloy with a minimum total energy of -19.68 Ry. It was considered a zinc blende lattice filled with atomic spheres of different sizes that preserve the density of the material and the symmetry of the lattice. Here, the method of linear muffin orbitals (LMTOs) (Andersen et al., 2007) was used to solve the Schrödinger equation of the FeAs crystal lattice. An effective potential LDA was used for the calculation of the electronic structure of AIAs (Cabrera, 2020) formulated based on density functional theory (DFT) (Kohn et al., 1996), a formalism that allows the use of McLaren's formulation (MacLaren et al., 1991) for the terms of trade and correlation in the effective potential.

Keywords: energy bands, semiconductors, ferromagnetism

INTRODUCCIÓN

Esta investigación efectuó un estudio que predice la posible transición de fase semiconductor a ferromagnética del arseniuro de hierro FeAs, aleación con red cristalina blanda de cinc, recientemente observadas experimentalmente. Las estructuras materiales que contienen enlaces tetraédricos de FeAs que, dependiendo de su densidad y distribución geométrica, pueden albergar diferentes estados fundamentales cuánticos que compiten entre sí y que van desde la superconductividad hasta el ferromagnetismo. Estos materiales tetraédricos basados en FeAs han generado mucha atención en los últimos años a partir del descubrimiento de los superconductores de alta temperatura basados en Fe y, más tarde, los semiconductores ferromagnéticos (FMS), de alto TC basados en Fe.

Esta investigación efectuó un estudio de la estructura electrónica de la aleación FeAs con DFT (Kohn, 1999) y LMTO (Skriver, 1984). Método que permitió tratar la ecuación de Schrödinger de la red como una matriz de 9×9 , que fue diagonalizada en el espacio recíproco o de momento cristalino \vec{k} de la red. Esto nos permitió conocer la estructura de las bandas de energía en las direcciones de alta simetría de la red cristalina, denotadas por Γ -X, Γ -L, Γ -K. Las bandas de energía y la densidad de estados DOS obtenidas para $\gamma = 0.0$, toda la fracción pequeña q_R de la carga de valencia residiendo en las esferas vacías de la red, resultaron con una distribución de estados electrónicos fuertemente asociados con una fase semiconductor.

Sin embargo, esto cambia notablemente en la estructura de las bandas y la densidad de estados con la redistribución de la fracción pequeña q_R en las esferas vacías de la red. Las bandas de energía y la densidad de estados obtenidas para $\gamma = 0.3$, esto es 70% de la fracción q_R de la carga de valencia residiendo en las esferas vacías de la red, resultaron con una alta concentración de estados electrónicos alrededor del tope de la banda de valencia y el fondo de la banda de conducción.



Lo que podemos asociar con una transición a la fase fuertemente ferromagnética de la aleación de arseniuro de hierro FeAs. La estructura electrónica obtenida para las demás distribuciones de la fracción pequeña q_R de la carga de valencia en las esferas vacías, resultaron con ligeros cambios en las bandas de energía y densidad de estados, pero manteniendo el carácter ferromagnético de los estados electrónicos.

Para el estudio de la estructura electrónica, las bandas de energía, la densidad de estados y energía total del FeAs aquí, fue empleado un potencial efectivo de tipo LDA usado por Cabrera en 2020 para el cálculo de las propiedades electrónicas del arseniuro de aluminio AlAs (Cabrera, 2020).



I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción de la realidad problemática

Partiendo de la propuesta en el proyecto de investigación inicial, el compuesto de arseniuro de hierro (FeAs) de enlace tetraédrico, es una aleación que pertenece al grupo VIII-V. Dependiendo de su distribución geométrica en los materiales, este puede sostener varios tipos de estados cuánticos fundamentales compitiendo entre sí, estados que van desde la superconductividad hasta el ferromagnetismo. Es un material con gran potencial para aplicaciones en superredes que evidencian ferromagnetismo de alta temperatura de Curie T_C y una magnetorresistencia elevada, que las hace prometedoras para aplicaciones espintrónicas.

En un trabajo de 2017 Griffin, publicó un estudio con teoría de funcional de densidad del FeAs, utilizó la aproximación de la densidad local LDA, la aproximación de gradiente generalizado (GGA) y método de funcionales híbridos para calcular las propiedades magnéticas y electrónicas del mono arseniuro de hierro, FeAs, que se forman en la estructura MnP (Griffin & Spaldin, 2017). Material de interés actual para posibles aplicaciones espintrónicas, además de ser el compuesto principal para los superconductores *pnictide* recientemente identificados. El estudio investigó los efectos de la elección del funcional de correlación de intercambio sobre las propiedades calculadas del compuesto FeAs, se calcularon la estructura cristalina, las propiedades magnéticas y la estructura electrónica con los funcionales LDA y GGA.

A pesar de un grupo relativamente extenso de trabajos sobre las propiedades de FeAs, todavía hay incertidumbre sobre las especificaciones de su estructura electrónica y lo que impulsa su orden magnético. El intento de mejorar el desempeño y la eficiencia del FeAs en dispositivos espintrónicos y en superredes ha motivado trabajos de investigación como las de oscilaciones cuánticas en el

estado de onda de densidad de spin anómalo del FeAs (Campbell et al., 2017), que presenta el estudio de las oscilaciones cuánticas del metal anti-ferromagnético (AFM) binario FeAs comparándolas con los estudios teóricos para la estructura de bandas electrónicas del estado de onda de densidad de spin anómalo de este material.

Recientemente en una publicación de 2021, Vu presento cálculos de primeros principios para predecir redes bidimensionales en aleaciones de BSb, AlSb, MgSi₂ (Vu et al., 2021) usando el formalismo de la DFT implementado en el programa *Viena Ab initio simulation package* (VASP) que usa un conjunto mínimo de base de ondas planas con energía cinética de 600eV para representar los orbitales de Kohn-Sham, una aproximación de Perdew-Burke-Ernzerhof al funcional de energía de intercambio y correlación.

La estructura electrónica de los materiales y aleaciones ferromagnéticas también se pueden determinar con el método de recursión o con el método de los orbitales lineales Muffin-Tin, LMTO por sus siglas en inglés (Nowak et al., 1991). Método implementado por el profesor Dr. H. J. Nowak en la Unidad de Post Grado de la Facultad de Ciencias Físicas en la Universidad Nacional Mayor de San Marcos en 1989 para el estudio de las propiedades electrónicas de materiales sólidos.

En el Perú no cuenta con la infraestructura, ni los laboratorios y los equipos modernos de última generación necesarios para realizar estudios experimentales de las propiedades magnéticas y electrónicas de materiales semiconductores ferromagnéticos. Sin embargo, es posible realizar estudios teóricos acerca de las propiedades electrónicas de semiconductores ferromagnéticos, como la aleación arseniuro de hierro, conocer los parámetros de la estructura de las bandas de energía, la densidad de estados DOS y la energía total. Lo que nos permitiría determinar otras propiedades de la red cristalina como la estabilidad del sistema y las posibles transiciones de fase de una aleación como la del FeAs.



1.2 Formulación del problema

El alto costo económico de los equipos para efectuar estudios experimentales, además del alto costo que demandaría mantener las condiciones especiales y controladas para medir las propiedades magnéticas, propiedades electrónicas o propiedades de superconductividad del FeAs y de otros materiales y aleaciones resulta un problema difícil de ser encarado en nuestro país. Ante este problema surge la pregunta:

1.2.1 Problema general

¿Será posible evidenciar una transición de fase semiconductor a ferromagnética en la estructura electrónica de la aleación arseniuro de hierro FeAs causada por la redistribución de la carga electrónica en la red cristalina blenda de cinc?

1.2.2 Problemas específicos

- ¿Se podrá determinar las bandas de energía y la densidad de estados DOS en la red cristalina blenda de cinc de la aleación Hierro-Arsénico FeAs?
- ¿Se podrá calcular la energía total del estado fundamental de la aleación Hierro-Arsénico FeAs con red cristalina blenda de cinc?

Como una alternativa de solución, se propone efectuar la presente investigación que usa el marco de la teoría del funcional de la densidad DFT (Kohn et al., 1996) y el método de los orbitales lineales *muffin-tin* ó LMTO (Skriver, 1984) para tratar la ecuación de Schrödinger de la red y diagonalizada permite obtener las propiedades electrónicas de aleaciones cristalinas.

Método que usa un potencial efectivo formulado con teoría del funcional de la densidad (DFT), toma la aproximación LDA para el término de intercambio y correlación usado recientemente en 2017 para obtener la estructura electrónica de las aleaciones GaP y SiC (Cabrera, 2017), se resuelve la ecuación de Schrödinger lo que permitirá conocer la estructura electrónica de la aleación FeAs.



1.3 Objetivos

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

1.3.1 Objetivo general

Conocer las propiedades electrónicas de la aleación de arseniuro de hierro FeAs con red blenda de cinc, resolviendo la ecuación de Schrödinger de un electrón en la red cristalina del FeAs usando el método LMTO.

1.3.2 Objetivos Específicos

- a) Determinar la estructura de las bandas de energía y la densidad de estados de la aleación FeAs con red cristalina blenda de cinc.
- b) Calcular la energía total de la aleación FeAs con red cristalina blenda de cinc.

1.4 Limitantes de la investigación

1.4.1 Teórico

Como la presente investigación es de tipo teórica básica no tiene limitantes, existen diversos métodos y técnicas para el cálculo de la estructura electrónica de la materia condensada. La investigación fue motivada por el interés de conocer la posible transición de fase semiconductor a ferromagnética que podría ser evidenciada en la estructura electrónica de la aleación FeAs y de otros nuevos compuestos con un alto potencial de aplicaciones tecnológicas.



La investigación teórica de la estructura electrónica 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 Hierro-Arsénico (FeAs).

1.4.2 Temporal

La delimitación temporal en el caso de la presente investigación es la del periodo establecido entre el 01 de abril de 2023 al 31 de marzo de 2024.

1.4.3 Espacial

Está limitada al espacio geográfico del ambiente de laboratorio de Física, en los laboratorios de química de la facultad de ingeniería química, de la UNAC, callao, Perú. Aunque a nivel de información por la internet, no está delimitada espacialmente.



II. MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes

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

2.1.1 Antecedente internacional

Como antecedente internacional se cuenta con estudios experimentales y teóricos acerca de las propiedades magnéticas y electrónicas que usan la aleación de FeAs reportados y que anteceden a este proyecto son:

En un estudio reciente de 2021, se publicó un trabajo sobre las propiedades de ferromagnetismo y magnetorresistencia gigante basadas en monocapas de FeAs con estructura blanda de cinc incrustadas en super redes semiconductoras de InAs (Anh et al., 2021). Estudio que reporta super redes (superlattice, SL) que exhiben un fuerte ferromagnetismo cuyo TC aumenta rápidamente con la disminución del espesor de la capa intermedia de FeAs. Además, las caracterizaciones de micro estructuras y los cálculos de primeros principios efectuados revelan que las posiciones de los átomos de Fe juegan un papel clave en el establecimiento del estado fundamental de ferromagnetismo (FM).

Recientemente en 2016, Anh publicó un estudio de la observación espontanea del desdoblamiento de spin en la estructura de bandas de semiconductores ferromagnéticos con estructura tipo blanda de cinc (Anh et al., 2016), usando la espectroscopia de túnel en estructuras de diodos de Esaki, se evidencia la observación de una energía de división de spin espontanea en la parte inferior de



la banda de conducción del semiconductor ferromagnético de tipo FeAs tetraédrico.

Tanaka en 2013, publicó el artículo de investigación: Recent progress in III-V based ferromagnetic semiconductors: band structure, fermi level, and tunneling transport (Tanaka et al., 2014), en la que se revisa el progreso reciente en los estudios de los semiconductores ferromagnéticos (FMS) de la tabla III-V y presenta el crecimiento de FMS de tipo n, InAs y FeAs y sus propiedades estructurales, magneto ópticas junto con el ferromagnetismo inducido por electrón. Estos materiales semiconductores ferromagnéticos que tienen estructura cristalina blenda de cinc muestran una excelente compatibilidad con heteroestructuras y dispositivos espintrónicas.

Rahman en 2006, publicó el trabajo: Magnetic and electronic structures of zinc-blende FeX (X = P, As, Sb) by first principles calculations (Rahman et al., 2006a), en la que presenta los cálculos de la estructura magnética y estructura electrónica para la fase hipotética blenda de cinc de FeX (X = P, As, Sb) usando el método de las ondas planas aumentadas linealizada de potencial completo (FLAPW) basado en la teoría del funcional de la densidad en la aproximación del gradiente generalizado (GGA). En este trabajo los cálculos de la estructura magnética y estructura electrónica del FeAs se efectúan para las constantes de red de GaAs, InAs y Si.

2.1.2 Antecedente nacional

Como antecedentes nacionales no hay investigación sobre la estructura electrónica de semiconductores ferromagnéticos de Hierro-Arsénico (FeAs), pero existen estudios de la estructura electrónica de otros materiales semiconductores usando el método de los orbitales lineales LMTO tales como:



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

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

2.2 Marco

2.2.1 Formalismo teórico del funcional de la densidad

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

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

En la que \hbar es la constante de Planck dividida entre la constante 2π ; la cantidad m denota la masa fundamental del electrón, la cantidad $e^2 = (e^+)^2/(4\pi\epsilon_0)$ es el cuadrado de la carga eléctrica del electrón multiplicada por la constante de Coulomb; aquí los \mathbf{r}_j denotan los vectores de posición del j-ésimo electrón; los otros \mathbf{R}_l, Z_l son los vectores de posición y el número atómico de los núcleos; E denota la energía del sistema y ψ es la función de onda electrónica para un sistema de N electrones que depende de 3N coordenadas espaciales y N de spin. En 1965, Kohn y Sham idearon un método práctico para calcular la densidad de carga electrónica ρ y la energía E del estado fundamental de un sistema de muchos electrones (Kohn & Sham, 1965). Método que se suele tratar con alguna aproximación, de modo que la formulación de Kohn-Sham de esta teoría del funcional de la densidad DFT dará resultados aproximados.

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

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

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

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

El funcional $E_{xc}[\rho]$, último a la derecha en la ecuación (2.2), un término cuyo funcional desconocido describe la energía potencial de intercambio y correlación para este sistema de electrones. Una muy buena aproximación para esta energía



potencial es el funcional de intercambio y correlación de un gas homogéneo de electrones de spin polarizado discutido por McLaren, (McLaren, 1993). La densidad de carga electrónica depende de los orbitales orto-normales $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ de número cuántico α , de acuerdo a la relación:

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

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

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

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

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

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

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

La cantidad ϵ_{α} dentro de la sumatoria son los conocidos multiplicadores de Lagrange, que en buena cuenta viene a ser los autovalores de energía que deseamos conocer. Tomando el valor extremo de la ecuación (2.7), esta nos



conduce directamente a la ecuación auto consistente de Kohn-Sham para un solo electrón que se mueve en un campo de potencial efectivo, que escrita en unidades atómicas es:

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

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden para un solo electrón que interacciona con el potencial efectivo $V_{ef}(\vec{r})$ de los demás electrones y de los iones que conforman la red cristalina del sistema (Kohn et al., 1996). Es un potencial local, que en principio contiene toda la información acerca de la estructura de la red cristalina de la aleación y, es de la forma siguiente:

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

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

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

Los cálculos de estructura electrónica usando DFT, podrían ser exactos, si la expresión funcional de la energía de intercambio y de correlación se conociera. En los cálculos de estructura electrónica con DFT se suele usar la aproximación de la densidad local (LDA) para el termino de intercambio y correlación.

2.2.2 El potencial efectivo en la red cristalina

Para obtener la estructura electrónica una aleación resolviendo la ecuación (2.8) es conveniente asumir que todo el volumen de la red cristalina está lleno esferas atómicas, ASA (Andersen & Jepsen, 1994). Esto reduce la formulación del



potencial y también simplifica el cálculo computacional, porque permite que este potencial efectivo se formule únicamente con una dependencia radial. Puesto que, si se toma un promedio sobre todo el ángulo sólido de la esfera atómica en este potencial efectivo, este se puede escribir de la forma

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

Ahora el electrón se mueve en un campo de potencial efectivo que es solo función de la coordenada radial r . Sin esta aproximación sería muy complicado de resolver la ecuación auto consistente de Kohn-Sham de un electrón que interacciona con el potencial efectivo de la red cristalina del sólido.

Con esta dependencia solo radial del potencial efectivo, la ecuación (2.8), de Kohn-Sham, ahora es tratable con la técnica de la separación de variables, así definiendo un orbital como el producto de tres funciones mutuamente independientes de la forma $\psi = R(r) \cdot \Theta \cdot \Phi$ y con una redefinición $P_l(r) = r \cdot R_l(r)$, la parte radial de la ecuación (2.8) ahora se reescribe como:

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

Esta es una ecuación diferencial de segundo orden, que ya podemos resolver con diferentes técnicas computacionales, como la técnica de diferencias finitas entre otras. Aquí las soluciones $P_l(r)$ de esta ecuación (2.12), que podemos llamar las ondas parciales, dependen del número cuántico principal l , y con $l = \alpha$ se representa la clase de orbital en las soluciones de (2.12).

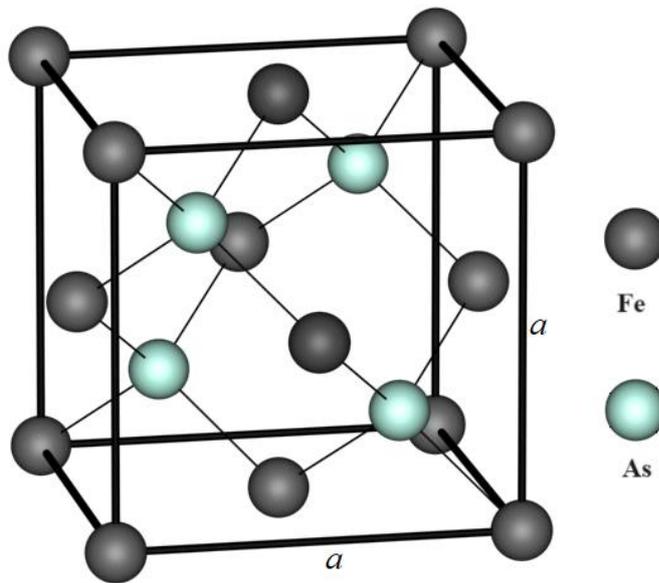
La parte angular de la ecuación diferencial que resulta de la separación de variables de la ecuación (2.8), no tratamos explícitamente aquí, ya que sus soluciones los armónicos esféricos se encuentran tabulados en la literatura de especialidad (Jackson, 2021).



Aquí se ha considerado una aleación arseniuro de hierro FeAs de fase cristalina con red tipo blenda de cinc, en inglés *zincblende*, con un parámetro o constante de red cubica $a = 5.580\text{\AA}$, (Rahman et al., 2006b).

Figura 1

Estructura blenda de cinc de aleación FeAs



Fuente: NANOPDF.com

La red tipo blenda de cinc es una estructura cristalina abierta que presenta regiones a lo largo de las diagonales de la red sin la ocupación atómica correspondiente, esta red cristalina se puede considerar como dos redes de Bravais interpenetradas y desplazadas a lo largo de la diagonal de la red cúbica, por un cuarto de longitud de la constante de la red cristalina. Se puede considerar como dos redes cristalinas de caras centradas, red FCC, superpuestas entre sí, con puntos de base en $(0,0,0)a$ y $(1,1,1)a/4$, similar a la red cristalina de diamante, pero con dos tipos diferentes de átomos.

Las regiones de la diagonal sin ocupación atómica de esta red son llenadas con esferas vacías del tamaño de las otras esferas atómicas de la red cristalina, pero

preservando la simetría y sobre todo la densidad de la aleación material. Por otro lado, una pequeña parte de la carga electrónica de valencia externa al radio atómico regresa a sus esferas atómicas y el resto reside de manera uniforme las esferas vacías en la diagonal de la red cristalina. La fracción pequeña de esta carga electrónica externa se transfiere mediante un parámetro sin unidades, denotado por γ , el mismo que varía entre 0 y 1.

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

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

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

$$V_{M_i} = -\sum_{\vec{R}'}^4 2q_{\vec{R}'} \sum_{\vec{T}}' \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}' - \vec{T}|} \quad (2.14)$$

El apóstrofe ' en la sumatoria significa que en la doble sumatoria se excluye el término $\vec{R} = \vec{R}' + \vec{T}$. Siendo \vec{R} el vector de posición de la esfera vacía en el centro de la diagonal de la red cubica, \vec{R}' la posición de la segunda esfera vacía a lo largo

de la diagonal de la red cubica y \vec{T} el vector de posición de las otras esferas vacías de la red cristalina. Para determinar su contribución al potencial efectivo primero es necesario calcular el valor de la fracción pequeña carga externa a su propia esfera atómica de la red.

2.2.3 La densidad de carga electrónica en la red cristalina

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

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

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

La Figura 2 muestra la carga de valencia del átomo libre de Hierro que usaremos aquí, la Figura 3 muestra la carga de valencia del átomo libre para Arsénico. En ambos casos una fracción pequeña q_R de esta carga contribuye más allá de 3.0 *a.u.* y una parte de aquella carga reside en su propia esfera atómica y el resto en las esferas atómicas vacías de las diagonales de la red cristalina, (Cabrera, 2018).



Figura 2

Densidad de Carga electrónica de valencia en Fe.

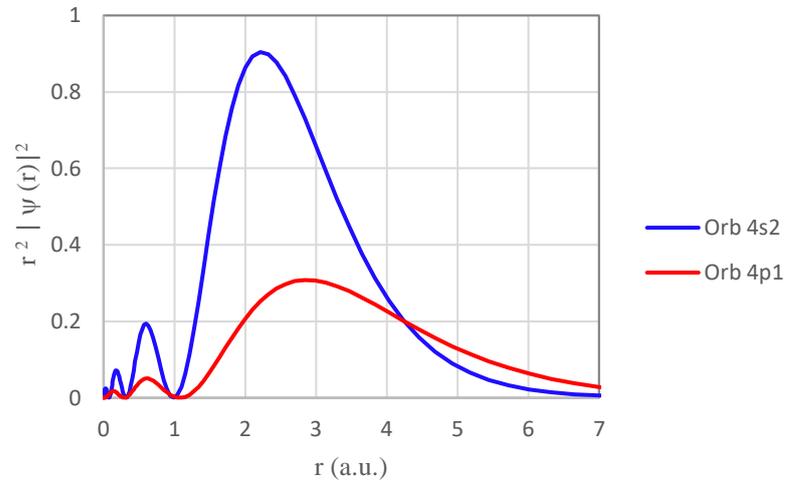
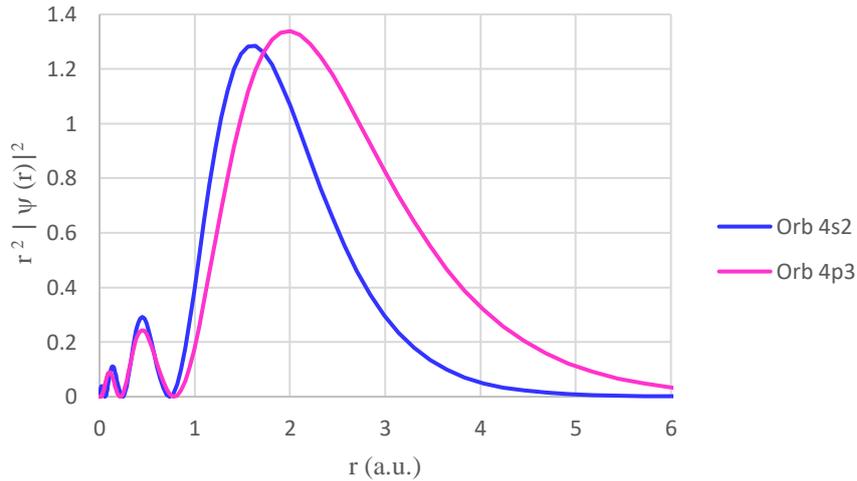


Figura 3

Densidad de carga electrónica de valencia en As



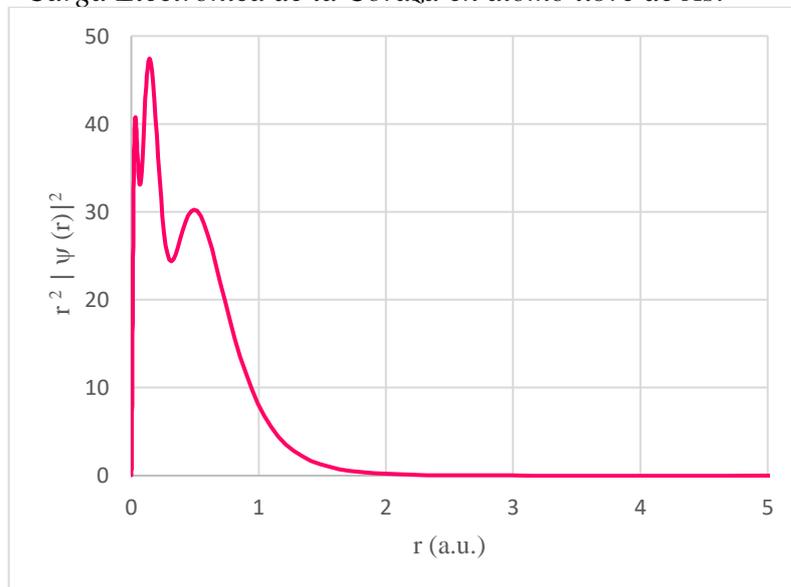
Por otro lado, la Figura 4 presenta la densidad de carga electrónica de la coraza para el átomo libre de antimonio, de esta se observa muy poca contribución de la carga electrónica de la coraza a la red cristalina más allá del radio de sus esferas atómicas de modo que esta retorna a su propia esfera atómica. Como los electrones de la coraza se consideran fuertemente ligados al núcleo dentro de sus

propias esferas atómicas, en general podemos asumir, que, para cualquiera de los átomos de la red cristalina, esta densidad de carga electrónica de la coraza no difiere de modo significativo con respecto a la densidad de la carga electrónica de la coraza $\rho_{c,libre}(\vec{r})$ de la del átomo libre.

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

Figura 4

Carga Electrónica de la Coraza en átomo libre de As.



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

acuerdo a la regla:

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

2.2.4 La energía total del sistema

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

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

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

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

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

La combinación de estas ecuaciones (2.17) y (2.18) con la ecuación (2.6), permite tener una expresión general para calcular la energía total del estado fundamental de un sistema de electrones en términos de los autovalores de energía ya obtenidos al calcular las bandas de energía, en términos de la clásica energía potencial de Coulomb y de la energía de intercambio y correlación en la aproximación LDA (Kohn, 1999), que es de la forma:

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

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

2.2.5 El método LMTO

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Las dos funciones de onda que son solución dentro de las esferas atómicas y solución en la región intersticial, se deben combinar a fin de obtener una solución completa en la ASA (Andersen et al., 2007), con la condición de que la función



orbital resultante y su derivada primera deben ser continuas en el borde de la esfera ($r = s_{\bar{R}}$). Con estas condiciones de contorno preestablecidas, la función regular que es solución de (2.29) dentro de la esfera es de la forma $\phi_{\bar{R}l}(r, E) \propto r^l$ para $r \rightarrow 0$. La solución no ordinaria de la ecuación de Laplace, $K_L(\vec{r})$, función que decae fuera de la esfera, puesto que se requiere que $\phi_{\bar{R}l}(r, E) \rightarrow 0$ para $r \rightarrow \infty$, permite plantear una función de onda muffin-tin orbital, MTO por sus siglas en inglés, de la forma siguiente:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Como las constantes de estructura $S_{\vec{R}L, \vec{R}'L'}$, ya tienen los datos acerca de la red



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

2.3 Marco Conceptual

La estructura electrónica se puede conocer al resolver la ecuación de Schrödinger del electrón en la red cristalina. Para lo cual se usa un potencial efectivo que depende de la densidad de carga electrónica de la red cristalina y es formulado mediante la teoría del funcional de la densidad (Perdew, 2003), teoría que usa la aproximación de la densidad local LDA (Kohn & Sham, 1965) para el potencial de intercambio y correlación.

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

2.3.1 Estructura electrónica calculada con ondas planas

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

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

Donde \vec{k} es el momento cristalino del electrón y n el índice de la banda de energía. El potencial cristalino $V(\vec{r})$ incluye tanto la interacción con la red como con los restantes electrones del cristal y posee, por tanto, las mismas propiedades de simetría de la red cristalina del sólido. Muchas de las técnicas para calcular la estructura electrónica de los sólidos, se basan en el desarrollo de la función de onda electrónica $\psi_n(\vec{r}, \vec{k})$ en términos de una base apropiada, por lo que el problema se reduce a encontrar los coeficientes del desarrollo de expansión. Una vez conocidas las funciones de onda ya se puede calcular la relación de dispersión electrónica $E(\vec{k})$, que constituye la estructura de bandas de energía de la red cristalina.

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

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

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

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

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

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



(2.40)

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

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

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

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

Este determinante es del orden del número de elementos de la base utilizada, por tanto, es conveniente usar una base de elementos finito, de modo que el determinante también será finito. Como el potencial cristalino cumple la simetría $V(-\vec{k}) = V(\vec{k})$ la matriz resultante es Hermítica y, por tanto, los auto valores de energía $E_n(\vec{k})$ son reales.

Como aplicación consideramos el estudio de Harrison (Harrison, 1960) para aluminio con red cubica de cara centrada, FCC, siendo a el parámetro de la red cristalina los vectores unitarios de la red reciproca

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

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



planas de la forma $e^{i(\vec{k}-\vec{k}_q)\cdot\vec{r}}$ en las direcciones:

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

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

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

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

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

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

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

2.4 Definición de términos básicos

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

Potencial efectivo: Es un campo escalar asociado a la energía potencial con el que un electrón interacciona en la red cristalina, y en el sistema atómico su unidad de



medida es un electrón-voltio entre un Coulomb (1 eV/C), en el sistema internacional su unidad es conocida como un voltio (1V).

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

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

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



III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1 Hipótesis

Hipótesis General

Es posible evidenciar una transición de fase semiconductor a ferromagnética en la estructura electrónica de la aleación Hierro-Arsénico (FeAs) causada por la redistribución de la carga electrónica en la red cristalina, asociada con una energía total del estado fundamental más estable.

Hipótesis Específica:

- a) La estructura electrónica de la aleación Hierro-Arsénico FeAs, obtenida al resolver la ecuación de Schrödinger del electrón en la red cristalina, evidenciara una transición de fase semiconductor a ferromagnética de esta aleación.
- b) La energía total asociada al estado fundamental ferromagnético será de mayor estabilidad.

3.2 Definición conceptual de variables

La variable independiente: **Vector de onda \mathbf{k}** ó momento cristalino, es la variable del espacio recíproco definida como 2π rad entre la longitud de onda λ que es medida en metro.

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



3.3 Operacionalización de variables

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

Energía: energía de las bandas ϵ , se mide en unidades atómicas 1Rydberg

Tabla 1
Operacionalización de variables

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



IV DISEÑO METODOLÓGICO

4.1 Tipo y diseño de la Investigación

Este proyecto acerca de la estructura electrónica como: las bandas de energía, la densidad de estados DOS de la aleación Hierro-Arsénico (FeAs) es una investigación teórica-básica. Técnicamente es una investigación teórica en el campo de la Física del Estado Sólido con código UNESCO 2211, Subcampos aleaciones (221101) y semiconductores (221125). La estructura electrónica de los materiales y aleaciones sólidas 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, 1984). 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 (Nowak et al., 1991). 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 los semiconductores ferromagnéticos.

4.1.1 Tipo: investigación teórica-básica.

4.1.2 Diseño: La investigación se resume en:

- a) Búsqueda de información en referencia al compuesto de Hierro-Arsénico FeAs.
- b) El cálculo del potencial efectivo usando la densidad electrónica del sólido y el cálculo de los parámetros potenciales LMTO.



- c) El cálculo de las bandas de energía y de la densidad de estados, resolviendo la ecuación de Schrödinger para la red cristalina de FeAs.
- d) Cálculo de la energía total del FeAs 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, se pretende resolver la ecuación de Schrödinger con el método de los orbitales lineales muffin-tin o método LMTO de O. K. Andersen (Andersen et al., 2007) lo que nos permite conocer la estructura electrónica del FeAs y calcular su energía total.

4.3 Población y muestra

La muestra corresponde a la aleación de Hierro-Arsénico (FeAs) red cristalina tipo blenda de cinc (*Zinc-blende*).

4.4 Lugar de estudio y periodo desarrollado

El estudio se efectuará en el ambiente del laboratorio de Física, perteneciente al Laboratorio de Química de la Facultad de Ingeniería Química, UNAC.

4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de información

Este proyecto es una investigación teórica básica.

4.6 Análisis y procesamiento de datos

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



V. RESULTADOS

5.1 Resultados descriptivos

5.1.1 El potencial efectivo de la red cristalina

El programa ATOM.FOR (Dexclaus, 1969) en lenguaje fortran, es un software de uso libre, que permite obtener la densidad de carga electrónica del átomo libre del hierro y de arsénico la cual fue distribuida en la red cristalina de FeAs. Con esta carga calculamos el potencial efectivo de la red cristalina, de cada clase de átomo y de las esferas vacías de la celda unitaria. Este potencial efectivo usado para resolver la ecuación de Schrödinger, fue calculado para diferentes valores de la fracción pequeña q_R de la carga de valencia residiendo en las esferas vacías de la red cristalina. Los resultados más significativos, para los casos del 100% ($\gamma = 0.0$), 70% ($\gamma = 0.3$) y 0.0% ($\gamma = 1.0$) de la carga q_R en las esferas vacías, se presentan en la Figura 5, Figura 6 y Figura 7 a continuación.

Figura 5

Potencial efectivo de átomo de Arsénico en la red de FeAs.

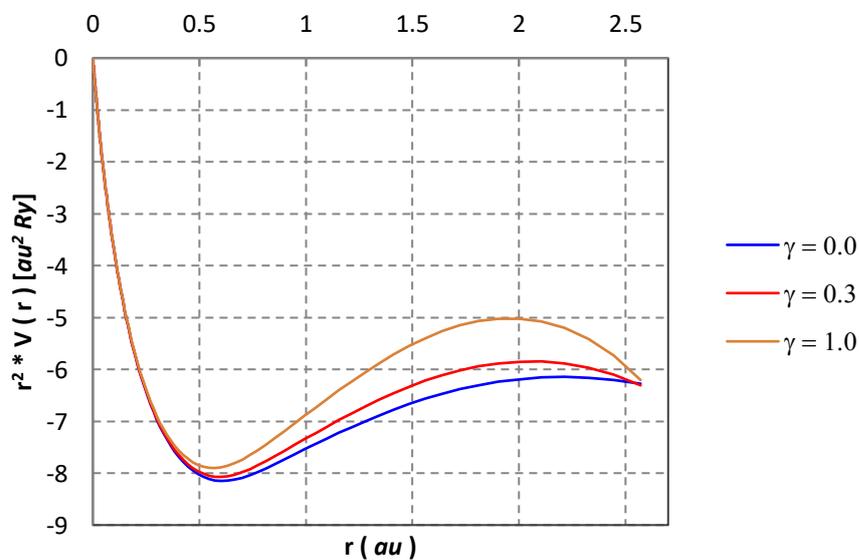


Figura 6

Potencial efectivo de átomo de hierro en la red de FeAs.

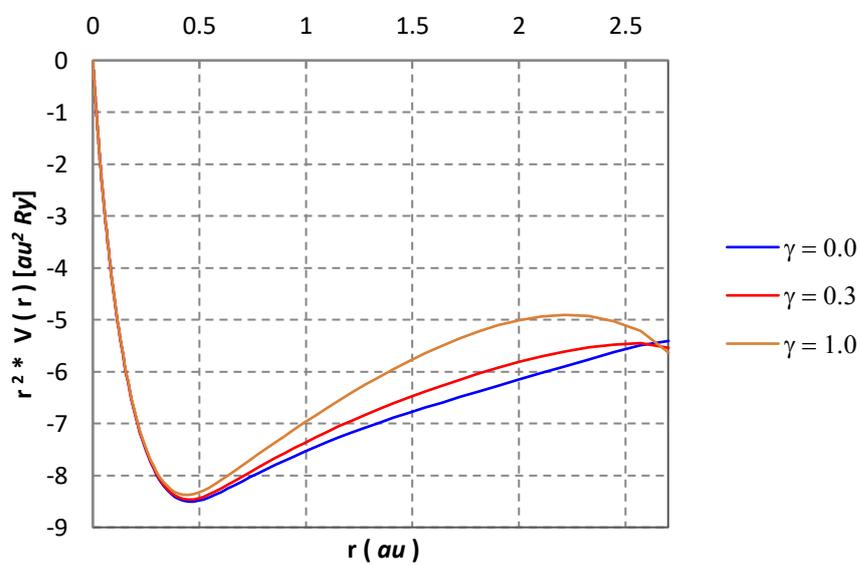
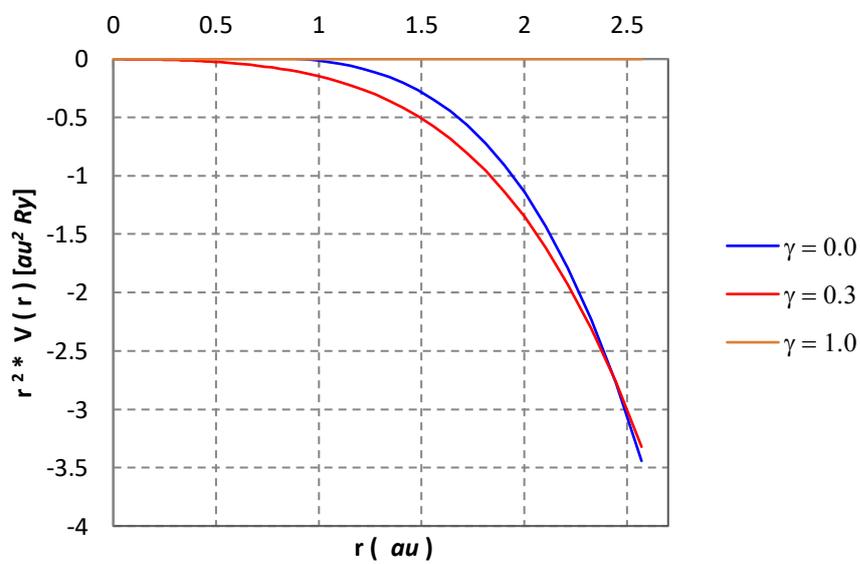


Figura 7

Potencial efectivo de esfera vacía en la red de FeAs.



5.1.2 Los parámetros potenciales del método LMTO

Los parámetros potenciales requeridos por el método LMTO, son usados para la correcta formulación de la base lineal de los orbitales muffin tin, (Andersen et al., 2007). Estos se determinaron resolviendo la ecuación de Schrödinger con el potencial efectivo de la red cristalina del FeAs e imponiendo la continuidad de las funciones de onda en las zonas intersticiales. En la Tabla 2 y en la Tabla 3 se muestran los parámetros potenciales de las esferas atómicas y esferas vacías de la red, obtenidos para los casos del 100% ($\gamma = 0.0$) y 70% ($\gamma = 0.3$) de la carga electrónica externa q_R residiendo homogéneamente en las esferas vacías de la red.

Tabla 2
Parámetros Potenciales LMTO de esferas atómicas en la red del FeAs

Parámetro γ	Parámetros Potenciales	Arsénico			Hierro		
		s	p	d	s	p	d
0.0	ε_μ (Ry)	-0.592	0.517	2.300	-1.283	-0.288	1.336
	Q_μ	0.426	0.100	0.042	0.401	0.084	0.032
	C_μ (Ry)	-0.592	0.517	2.300	-1.283	-0.288	1.336
	Δ_μ (Ry)	-0.456	0.418	-0.385	-0.319	0.311	-0.327
	ρ_μ (Ry ⁻²)	0.184	0.183	0.206	0.403	0.344	0.266
0.3	ε_μ (Ry)	-0.500	0.613	-0.656	-1.189	-0.198	1.418
	Q_μ	0.427	0.100	0.001	0.402	0.084	0.032
	C_μ (Ry)	-0.500	0.613	-0.656	-1.189	-0.198	1.418
	Δ_μ (Ry)	-0.460	0.422	0.119	-0.326	0.317	-0.331
	ρ_μ (Ry ⁻²)	0.181	0.181	1.145	0.391	0.337	0.261

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

Parámetro γ	Parámetros Potenciales	Esfera Vacía 1			Esfera Vacía 2		
		s	p	d	s	p	d
0.0	ϵ_{μ} (Ry)	0.160	1.315	2.943	0.067	1.068	2.478
	Q_{μ}	0.403	0.093	0.039	0.404	0.093	0.039
	C_{μ} (Ry)	0.160	1.315	2.943	0.067	1.068	2.479
	Δ_{μ} (Ry)	0.419	0.412	0.408	0.392	0.384	0.381
	ρ_{μ} (Ry ⁻²)	0.309	0.197	0.167	0.353	0.276	0.186
0.3	ϵ_{μ} (Ry)	0.094	1.256	2.888	0.021	1.028	2.443
	Q_{μ}	0.402	0.092	0.039	0.402	0.092	0.039
	C_{μ} (Ry)	0.094	1.256	2.888	0.021	1.028	2.444
	Δ_{μ} (Ry)	0.414	0.408	0.405	0.386	0.381	0.378
	ρ_{μ} (Ry ⁻²)	0.319	0.265	0.179	0.365	0.255	0.208

5.1.3 Estructura de las bandas de energía del FeAs.

Los parámetros potenciales y la base lineal de los orbitales muffins tin (LMTO) permite tratar la ecuación de Schrödinger de la red cristalina del FeAs como una matriz de 9x9. Esta matriz fue diagonalizada en el espacio recíproco o de momento cristalino \mathbf{k} . Los autovalores de energía se calcularon en las direcciones cristalográficas $\Gamma - X$, $\Gamma - L$ y $\Gamma - K$ direcciones de alta simetría que toma el momento cristalino \mathbf{k} en la red cristalina de FeAs y para cada fracción de q_R residiendo en las esferas vacías. La estructura de las bandas de energía (relación de dispersión) obtenidas para la fase semiconductor ($\gamma = 0.0$) y la fase ferromagnética presentamos en la Tabla 4, Tabla 5, Tabla 6, Tabla 7, Tabla 8 y Tabla 9 de las páginas siguientes.



Tabla 4*Bandas de energía de fase semiconductor del FeAs, en dirección $\Gamma - L$*

Parámetro $\gamma = 0.0$, dirección cristalográfica $\Gamma - L$							
k(1,1,1)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
0	-1.177	-0.221	-0.221	-0.221	0.033	0.254	0.254
-0.05	-1.177	-0.225	-0.221	-0.221	0.037	0.254	0.255
-0.1	-1.175	-0.238	-0.222	-0.222	0.047	0.255	0.258
-0.15	-1.173	-0.257	-0.225	-0.225	0.061	0.258	0.263
-0.2	-1.170	-0.281	-0.228	-0.228	0.076	0.264	0.269
-0.25	-1.165	-0.307	-0.231	-0.231	0.089	0.272	0.277
-0.3	-1.160	-0.334	-0.236	-0.236	0.099	0.285	0.285
-0.35	-1.155	-0.362	-0.240	-0.240	0.105	0.294	0.294
-0.4	-1.148	-0.390	-0.245	-0.245	0.108	0.302	0.302
-0.45	-1.141	-0.418	-0.250	-0.250	0.109	0.309	0.309
-0.5	-1.134	-0.445	-0.254	-0.254	0.107	0.314	0.314
-0.55	-1.126	-0.470	-0.259	-0.259	0.105	0.318	0.318
-0.6	-1.118	-0.495	-0.263	-0.263	0.101	0.321	0.321
-0.65	-1.110	-0.517	-0.267	-0.267	0.098	0.322	0.322
-0.7	-1.102	-0.538	-0.271	-0.271	0.095	0.321	0.321
-0.75	-1.095	-0.556	-0.274	-0.274	0.092	0.320	0.320
-0.8	-1.089	-0.572	-0.276	-0.276	0.090	0.319	0.319
-0.85	-1.083	-0.584	-0.279	-0.279	0.088	0.318	0.318
-0.9	-1.079	-0.593	-0.280	-0.280	0.087	0.317	0.317
-0.95	-1.076	-0.599	-0.281	-0.281	0.086	0.316	0.316
-1	-1.076	-0.601	-0.281	-0.281	0.085	0.316	0.316

Tabla 5*Bandas de Energía de fase semiconductor del FeAs, en dirección $\Gamma - X$*

Parámetro $\gamma = 0.0$, dirección cristalográfica $\Gamma - X$							
k(0,1,0)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
0.000	-1.177	-0.221	-0.221	0.033	0.254	0.254	0.817
0.050	-1.176	-0.225	-0.222	0.038	0.252	0.257	0.786
0.100	-1.174	-0.238	-0.226	0.052	0.245	0.265	0.735
0.150	-1.171	-0.258	-0.232	0.072	0.235	0.277	0.685
0.200	-1.167	-0.280	-0.240	0.096	0.223	0.294	0.638
0.250	-1.162	-0.306	-0.250	0.120	0.208	0.315	0.596
0.300	-1.155	-0.332	-0.261	0.143	0.191	0.339	0.561
0.350	-1.147	-0.358	-0.272	0.161	0.176	0.366	0.535
0.400	-1.139	-0.385	-0.283	0.155	0.179	0.394	0.520
0.450	-1.129	-0.410	-0.294	0.138	0.184	0.424	0.518
0.500	-1.119	-0.436	-0.304	0.121	0.181	0.454	0.528
0.550	-1.109	-0.460	-0.314	0.105	0.172	0.485	0.549
0.600	-1.098	-0.483	-0.324	0.091	0.159	0.517	0.577
0.650	-1.088	-0.504	-0.332	0.077	0.145	0.548	0.610
0.700	-1.077	-0.523	-0.339	0.065	0.131	0.579	0.645
0.750	-1.067	-0.541	-0.346	0.054	0.118	0.609	0.681
0.800	-1.059	-0.556	-0.351	0.045	0.106	0.638	0.716
0.850	-1.051	-0.568	-0.355	0.037	0.097	0.665	0.746
0.900	-1.046	-0.577	-0.358	0.032	0.091	0.688	0.771
0.950	-1.042	-0.583	-0.360	0.029	0.087	0.705	0.787
1.000	-1.041	-0.585	-0.360	0.028	0.086	0.711	0.792



Tabla 6*Bandas de Energía en fase semiconductor del FeAs, en dirección $\Gamma - K$*

Parámetro $\gamma = 0.0$, dirección cristalográfica $\Gamma - K$							
k(1,1,0)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
2.000	-1.177	-0.221	-0.221	-0.221	0.033	0.254	0.254
1.950	-1.176	-0.232	-0.223	-0.221	0.043	0.254	0.255
1.900	-1.172	-0.261	-0.231	-0.223	0.066	0.253	0.260
1.850	-1.166	-0.298	-0.245	-0.226	0.093	0.253	0.267
1.800	-1.157	-0.339	-0.262	-0.230	0.120	0.256	0.277
1.750	-1.147	-0.379	-0.283	-0.235	0.143	0.262	0.289
1.700	-1.135	-0.417	-0.306	-0.242	0.164	0.273	0.304
1.650	-1.122	-0.452	-0.331	-0.251	0.181	0.289	0.322
1.600	-1.108	-0.482	-0.356	-0.261	0.194	0.309	0.342
1.550	-1.094	-0.507	-0.381	-0.272	0.199	0.321	0.350
1.500	-1.080	-0.527	-0.403	-0.283	0.194	0.321	0.376
1.450	-1.068	-0.541	-0.423	-0.295	0.179	0.324	0.409
1.400	-1.058	-0.550	-0.439	-0.307	0.159	0.326	0.446
1.350	-1.051	-0.556	-0.449	-0.318	0.137	0.319	0.484
1.300	-1.045	-0.560	-0.450	-0.328	0.116	0.293	0.521
1.250	-1.042	-0.565	-0.442	-0.338	0.096	0.251	0.558
1.200	-1.041	-0.571	-0.426	-0.346	0.078	0.201	0.595
1.150	-1.040	-0.576	-0.405	-0.352	0.062	0.153	0.633
1.100	-1.040	-0.581	-0.383	-0.357	0.047	0.115	0.670
1.050	-1.041	-0.584	-0.367	-0.359	0.034	0.093	0.699
1.000	-1.041	-0.585	-0.360	-0.360	0.028	0.086	0.711



Tabla 7*Bandas de Energía en fase ferromagnética del FeAs, en dirección $\Gamma - L$*

Parámetro $\gamma = 0.3$, dirección cristalográfica $\Gamma - L$							
k(1,1,1)	e(Ry)						
0	-1.097	-0.695	-0.695	-0.661	-0.661	-0.022	-0.022
-0.05	-1.096	-0.695	-0.695	-0.661	-0.661	-0.031	-0.024
-0.1	-1.095	-0.695	-0.695	-0.661	-0.661	-0.054	-0.027
-0.15	-1.093	-0.695	-0.694	-0.661	-0.661	-0.082	-0.032
-0.2	-1.090	-0.694	-0.694	-0.661	-0.661	-0.114	-0.039
-0.25	-1.086	-0.694	-0.693	-0.661	-0.661	-0.148	-0.047
-0.3	-1.081	-0.693	-0.692	-0.660	-0.660	-0.182	-0.056
-0.35	-1.076	-0.692	-0.692	-0.660	-0.660	-0.216	-0.065
-0.4	-1.070	-0.691	-0.690	-0.660	-0.660	-0.250	-0.075
-0.45	-1.064	-0.690	-0.688	-0.659	-0.659	-0.284	-0.085
-0.5	-1.058	-0.689	-0.686	-0.659	-0.659	-0.317	-0.094
-0.55	-1.051	-0.689	-0.682	-0.658	-0.658	-0.349	-0.103
-0.6	-1.045	-0.688	-0.678	-0.657	-0.657	-0.380	-0.111
-0.65	-1.038	-0.688	-0.673	-0.657	-0.657	-0.409	-0.119
-0.7	-1.032	-0.687	-0.667	-0.656	-0.656	-0.437	-0.126
-0.75	-1.026	-0.687	-0.659	-0.655	-0.655	-0.463	-0.132
-0.8	-1.022	-0.687	-0.654	-0.654	-0.651	-0.487	-0.137
-0.85	-1.018	-0.687	-0.654	-0.654	-0.642	-0.509	-0.141
-0.9	-1.015	-0.686	-0.653	-0.653	-0.633	-0.527	-0.144
-0.95	-1.013	-0.686	-0.653	-0.653	-0.626	-0.540	-0.146
-1	-1.012	-0.686	-0.653	-0.653	-0.623	-0.545	-0.147



Tabla 8*Bandas de Energía en fase ferromagnética del FeAs, dirección $\Gamma - X$*

Parámetro $\gamma = 0.3$, dirección cristalográfica $\Gamma - X$							
k(0,1,0)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
0.000	-1.097	-0.695	-0.695	-0.661	-0.022	-0.022	0.081
0.050	-1.096	-0.695	-0.695	-0.661	-0.031	-0.026	0.089
0.100	-1.094	-0.695	-0.694	-0.661	-0.052	-0.035	0.109
0.150	-1.091	-0.695	-0.694	-0.662	-0.078	-0.048	0.134
0.200	-1.087	-0.696	-0.693	-0.662	-0.106	-0.065	0.159
0.250	-1.082	-0.696	-0.691	-0.662	-0.134	-0.083	0.183
0.300	-1.076	-0.696	-0.690	-0.663	-0.163	-0.103	0.200
0.350	-1.069	-0.697	-0.688	-0.663	-0.192	-0.123	0.204
0.400	-1.062	-0.697	-0.686	-0.663	-0.221	-0.142	0.195
0.450	-1.053	-0.697	-0.683	-0.663	-0.250	-0.161	0.183
0.500	-1.045	-0.697	-0.681	-0.663	-0.279	-0.179	0.171
0.550	-1.036	-0.697	-0.678	-0.662	-0.307	-0.196	0.159
0.600	-1.027	-0.697	-0.676	-0.659	-0.334	-0.211	0.150
0.650	-1.018	-0.697	-0.673	-0.656	-0.361	-0.226	0.141
0.700	-1.010	-0.698	-0.671	-0.652	-0.387	-0.238	0.135
0.750	-1.003	-0.698	-0.669	-0.649	-0.411	-0.249	0.130
0.800	-0.996	-0.699	-0.667	-0.648	-0.433	-0.258	0.127
0.850	-0.991	-0.699	-0.665	-0.648	-0.452	-0.265	0.125
0.900	-0.987	-0.699	-0.664	-0.647	-0.467	-0.270	0.123
0.950	-0.985	-0.699	-0.663	-0.647	-0.478	-0.273	0.123
1.000	-0.984	-0.700	-0.663	-0.647	-0.481	-0.274	0.123

Tabla 9*Bandas de Energía con fase ferromagnética del FeAs, en dirección $\Gamma - K$*

Parámetro $\gamma = 0.3$, dirección cristalográfica $\Gamma - K$							
k(1,1,0)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)	e(Ry)
2.000	-1.097	-0.695	-0.695	-0.661	-0.022	-0.022	0.081
1.950	-1.095	-0.695	-0.695	-0.661	-0.043	-0.029	0.096
1.900	-1.092	-0.695	-0.694	-0.661	-0.085	-0.047	0.124
1.850	-1.086	-0.694	-0.692	-0.661	-0.134	-0.073	0.151
1.800	-1.079	-0.694	-0.691	-0.662	-0.182	-0.106	0.176
1.750	-1.069	-0.692	-0.689	-0.662	-0.230	-0.142	0.200
1.700	-1.059	-0.690	-0.686	-0.662	-0.275	-0.179	0.224
1.650	-1.047	-0.687	-0.683	-0.662	-0.317	-0.216	0.247
1.600	-1.036	-0.686	-0.679	-0.661	-0.355	-0.250	0.267
1.550	-1.025	-0.685	-0.673	-0.660	-0.390	-0.282	0.280
1.500	-1.015	-0.685	-0.668	-0.660	-0.420	-0.311	0.281
1.450	-1.006	-0.685	-0.664	-0.658	-0.446	-0.334	0.269
1.400	-0.999	-0.686	-0.663	-0.657	-0.466	-0.353	0.250
1.350	-0.993	-0.687	-0.663	-0.655	-0.479	-0.365	0.230
1.300	-0.990	-0.688	-0.664	-0.654	-0.485	-0.369	0.210
1.250	-0.987	-0.690	-0.665	-0.652	-0.485	-0.363	0.192
1.200	-0.985	-0.693	-0.665	-0.651	-0.484	-0.348	0.175
1.150	-0.985	-0.695	-0.665	-0.649	-0.482	-0.325	0.161
1.100	-0.984	-0.697	-0.664	-0.648	-0.482	-0.301	0.145
1.050	-0.984	-0.699	-0.663	-0.647	-0.481	-0.282	0.130
1.000	-0.984	-0.700	-0.663	-0.647	-0.481	-0.274	0.123



Figura 8

Bandas de Energía del FeAs, $\gamma = 0.0$

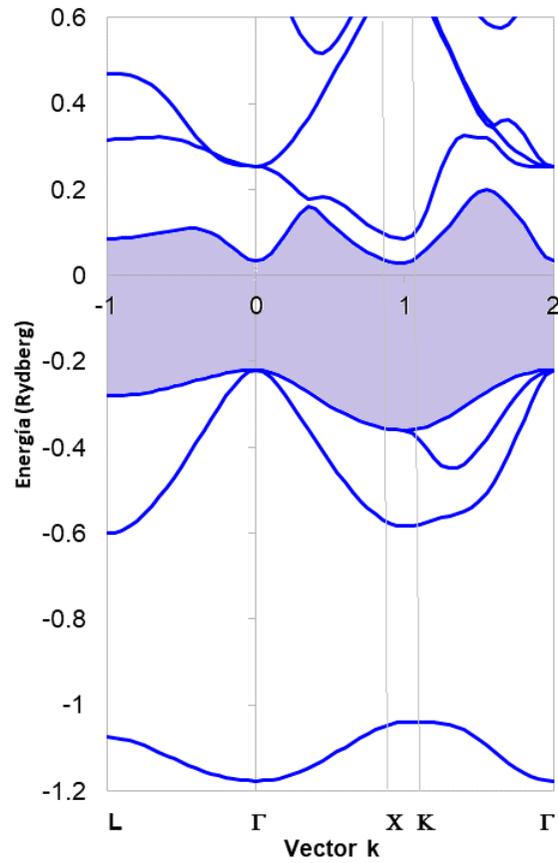


Figura 9

Bandas de energía del FeAs, $\gamma = 0.3$

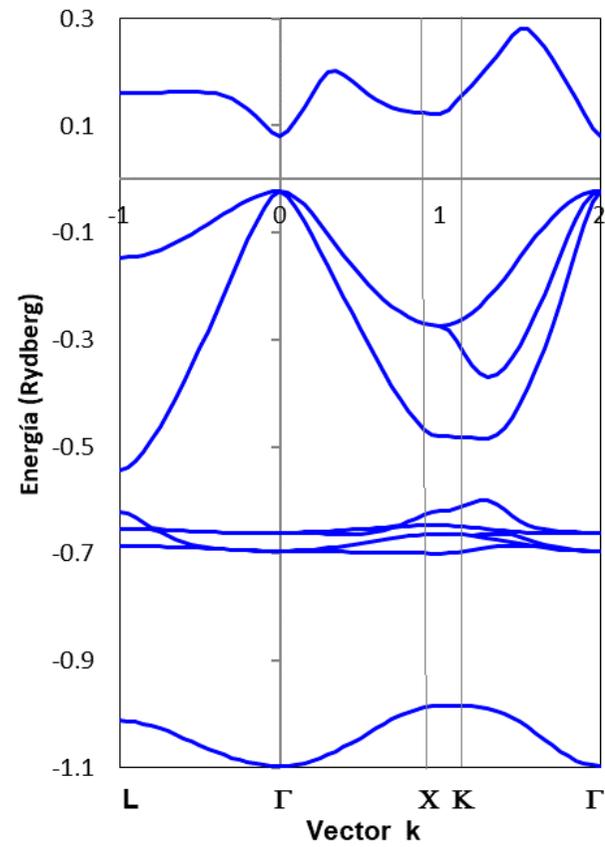


Figura 10

Bandas de Energía del FeAs, $\gamma = 0.6$

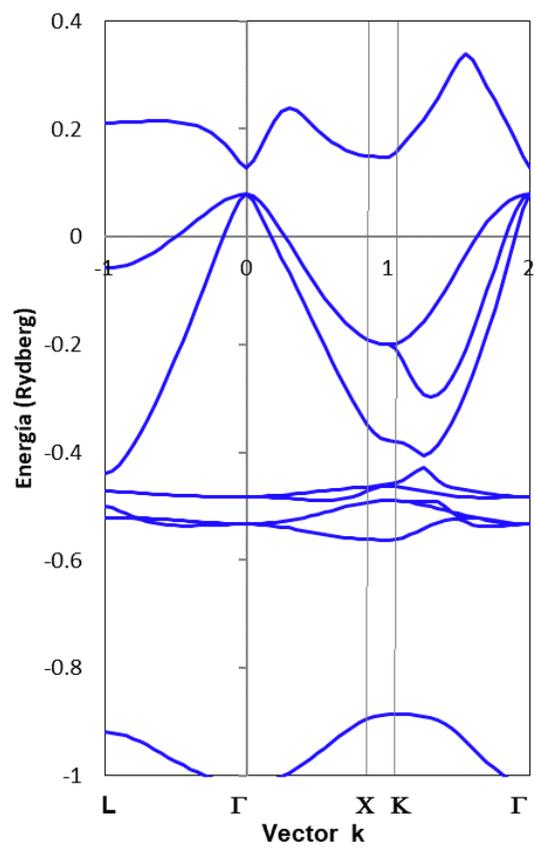
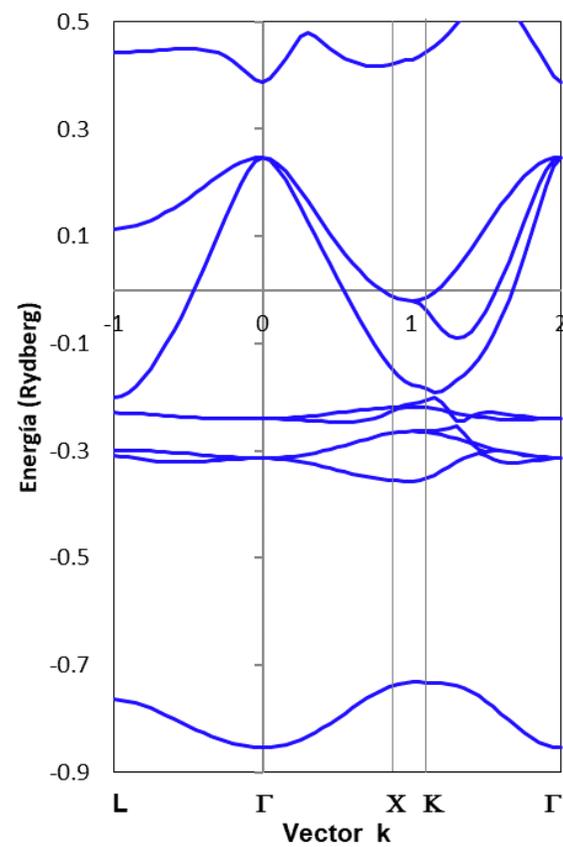


Figura 11

Bandas de energía del FeAs, $\gamma = 1.0$



5.1.4 La densidad de estados del FeAs

La densidad de estados del FeAs se calculó para diferentes fracciones de la carga q_R en las esferas vacías. La Tabla 10 muestran la DOS obtenida para la fase semiconductor ($\gamma = 0.0$), la Tabla 11 para la fase ferromagnética ($\gamma = 0.3$). Casos en que el 100% y el 70% de la carga q_R reside en las esferas vacías de la red.

Tabla 10

La Densidad de Estados en fase semiconductor de Aleación FeAs

Resultados de la densidad de estados para $\gamma = 0.0$							
e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)
-1.200	0.000	-0.881	0.000	-0.562	49.985	-0.243	7.462
-1.186	0.000	-0.867	0.000	-0.548	19.230	-0.229	3.861
-1.172	1.389	-0.853	0.000	-0.534	11.090	-0.216	0.000
-1.158	3.627	-0.840	0.000	-0.521	8.297	-0.202	0.000
-1.145	5.144	-0.826	0.000	-0.507	6.384	-0.188	0.000
-1.131	6.752	-0.812	0.000	-0.493	5.100	-0.174	0.000
-1.117	8.768	-0.798	0.000	-0.479	4.306	-0.160	0.000
-1.103	11.394	-0.784	0.000	-0.465	3.643	-0.146	0.000
-1.089	15.652	-0.770	0.000	-0.451	3.072	-0.132	0.000
-1.075	25.707	-0.756	0.000	-0.437	9.283	-0.118	0.000
-1.061	27.887	-0.742	0.000	-0.424	19.197	-0.105	0.000
-1.047	29.924	-0.729	0.000	-0.410	16.396	-0.091	0.000
-1.034	0.000	-0.715	0.000	-0.396	16.028	-0.077	0.000
-1.020	0.000	-0.701	0.000	-0.382	17.442	-0.063	0.000
-1.006	0.000	-0.687	0.000	-0.368	21.749	-0.049	0.000
-0.992	0.000	-0.673	0.000	-0.354	28.276	-0.035	0.000
-0.978	0.000	-0.659	0.000	-0.340	26.615	-0.021	0.000
-0.964	0.000	-0.645	0.000	-0.326	27.628	-0.008	0.000
-0.950	0.000	-0.632	0.000	-0.313	27.255	0.006	0.000
-0.937	0.000	-0.618	0.000	-0.299	26.710	0.020	0.000
-0.923	0.000	-0.604	0.000	-0.285	27.292	0.034	0.262
-0.909	0.000	-0.590	4.693	-0.271	16.851	0.048	1.985
-0.895	0.000	-0.576	15.261	-0.257	11.443	0.062	3.031

Tabla 11*La Densidad de Estados en fase ferromagnética de Aleación FeAs*

Resultados de la densidad de estados para $\gamma = 0.3$							
e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)	e(Ry)	N(e)
-1.117	0.000	-0.815	0.000	-0.514	5.523	-0.212	18.768
-1.104	0.000	-0.802	0.000	-0.501	8.520	-0.199	18.670
-1.091	2.042	-0.789	0.000	-0.488	19.343	-0.186	18.015
-1.078	4.135	-0.776	0.000	-0.475	24.730	-0.173	17.571
-1.064	6.295	-0.763	0.000	-0.461	13.066	-0.160	17.676
-1.051	8.629	-0.750	0.000	-0.448	10.095	-0.147	15.969
-1.038	12.037	-0.737	0.000	-0.435	8.248	-0.134	11.039
-1.025	17.759	-0.724	0.000	-0.422	6.835	-0.121	9.109
-1.012	33.609	-0.711	0.000	-0.409	5.820	-0.107	7.432
-0.999	42.245	-0.697	26.363	-0.396	5.146	-0.094	5.982
-0.986	44.438	-0.684	130.639	-0.383	4.549	-0.081	4.781
-0.973	0.000	-0.671	114.165	-0.370	4.020	-0.068	3.736
-0.960	0.000	-0.658	144.094	-0.357	7.411	-0.055	2.812
-0.946	0.000	-0.645	29.006	-0.343	18.197	-0.042	1.827
-0.933	0.000	-0.632	26.274	-0.330	14.874	-0.029	0.318
-0.920	0.000	-0.619	34.210	-0.317	14.210	-0.016	0.000
-0.907	0.000	-0.606	30.184	-0.304	14.064	-0.003	0.000
-0.894	0.000	-0.593	0.000	-0.291	15.612	0.011	0.000
-0.881	0.000	-0.579	0.000	-0.278	17.519	0.024	0.000
-0.868	0.000	-0.566	0.000	-0.265	20.742	0.037	0.000
-0.855	0.000	-0.553	0.000	-0.252	20.363	0.050	0.000
-0.842	0.000	-0.540	0.344	-0.239	19.187	0.063	0.000
-0.828	0.000	-0.527	3.062	-0.225	19.086	0.076	0.000



Figura 12

Densidad de Estados en fase semiconductora del FeAs, $\gamma = 0.0$

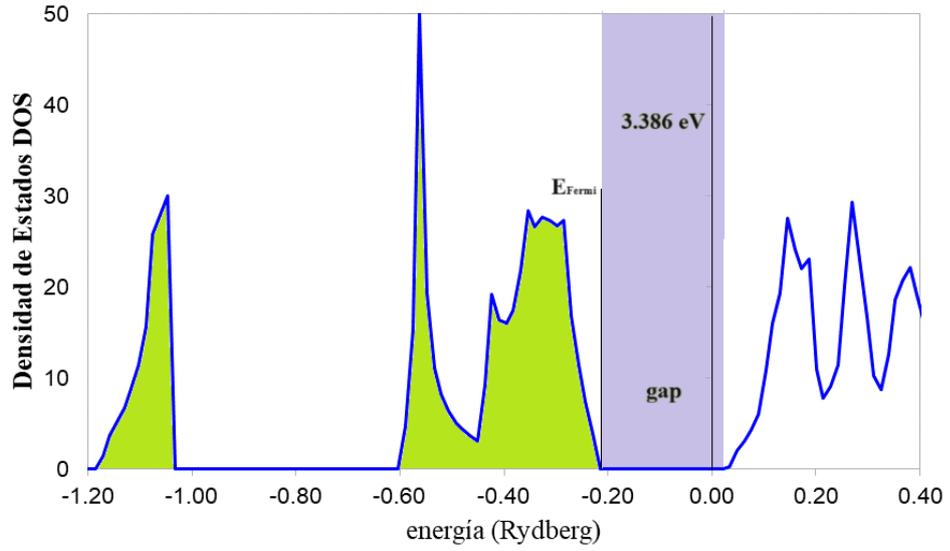
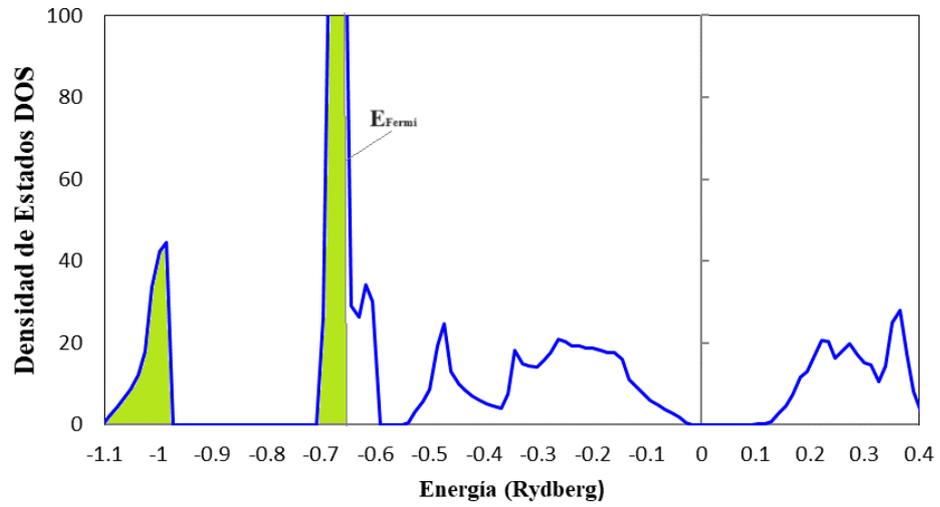


Figura 13

Densidad de Estados en fase ferromagnética del FeAs, $\gamma = 0.3$



5.1.5 Energía total en la aleación FeAs

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

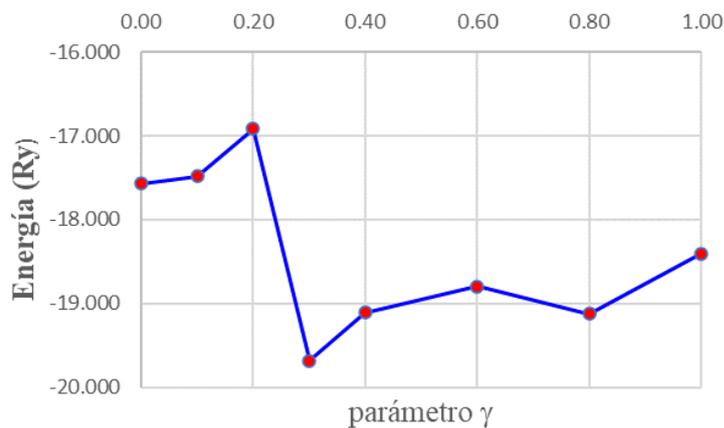
Tabla 12

Energía Total en Aleación Cristalina FeAs.

γ (%)	E_{Total} (Ry)	E_{Fermi} (Ry)
0.00	-17.570	-0.216
0.10	-17.487	-0.182
0.20	-16.918	0.114
0.30	-19.683	-0.661
0.40	-19.111	-0.603
0.60	-18.796	-0.486
0.80	-19.125	-0.373
1.00	-18.405	-0.255

Figura 14

Energía Total de aleación FeAs en Rydberg.



5.2 Resultados inferenciales

Ninguna, la presente investigación es teórica básica.

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

Ninguna.

VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

La estructura de las bandas de energía obtenidas para $\gamma = 0.0$ toda la fracción pequeña q_R de la carga de valencia fuera de las esferas atómicas y residiendo en las esferas vacías de la red, resultaron con el perfil característico de los materiales semiconductores. Estas bandas de energía presentan una brecha indirecta de energía prohibida entre el tope de la banda de valencia en el punto Γ y el mínimo de la banda de conducción en el punto X, que es de 0.248Ry ó 3.378eV. La brecha entre los puntos de simetría Γ -L es de 0.306Ry ó 4.163eV; entre los puntos de simetría Γ -K es de 0.268Ry ó 3.64eV; entre los puntos de simetría Γ - Γ es de 0.254Ry ó 3.449eV. El perfil de la densidad de estados obtenida para este caso de $\gamma = 0.0$ también resultó confirmando la brecha de energía prohibida entre los estados de valencia y los estados de conducción, evidenciando de forma indirecta la fase anti ferromagnética de carácter semiconductor para esta aleación FeAs.

La estructura de las bandas de energía obtenida para $\gamma = 0.2$, el 80% de la fracción pequeña q_R de la carga de valencia residiendo en las esferas vacías de la red, resultaron con un corrimiento de energía de las bandas de valencia hacia las bandas de conducción. La gráfica de la estructura de las bandas de energía ahora ya no presenta la brecha de energía prohibida, pues el tope de la banda de valencia coincide con el mínimo de la banda de conducción para la energía de 0.114Ry. La densidad de estados obtenida para este caso, confirma este valor de 0.114Ry para el tope de los estados de valencia y el mínimo de los estados de conducción, con una brecha de energía prohibida nula. Estructura electrónica que muestra el carácter de semi metal a la aleación FeAs.

La estructura de las bandas de energía obtenida para $\gamma = 0.3$, el 70% de la fracción pequeña q_R de la carga de valencia residiendo en las esferas vacías de la red,



resultaron con una gran redistribución de los estados electrónicos entre la banda de valencia y la conducción. La gráfica de la estructura de las bandas de energía ahora presenta una gran concentración de estados electrónicos en la región del tope de la banda de valencia y del mínimo de la banda de conducción para la energía de -0.661Ry . La densidad de estados obtenida para este caso, confirma la concentración de estados electrónicos para esta energía de -0.661Ry en el tope de los estados de valencia y el mínimo de los estados de conducción. Estructura electrónica que muestra el carácter ferromagnético de la aleación FeAs, lo que demuestra la hipótesis esta investigación.

La energía total asociada con la estructura electrónica de la fase semiconductor y anti ferromagnética obtenida fue de -17.57Ry . Por otro lado, la energía total asociada con la estructura electrónica de la fase ferromagnética fue de -19.68Ry y resulto ser mínima respecto de los otros valores obtenidos en los cálculos, demostrando la posible transición de fase semiconductor a ferromagnética, lo que demuestra la hipótesis de la investigación.

6.2 Contrastación de hipótesis con otros estudios similares

Los resultados obtenidos en la presente investigación, muestran la estructura de las bandas de energía y la densidad de estados correspondiente asociadas con una fase anti ferromagnética y semiconductor con brecha prohibida de 3.378eV de la aleación FeAs.

La distribución de la fracción pequeña q_R de la carga electrónica de valencia que está fuera de su esfera atómica y residiendo en las esferas vacías de la red cristalina, reconfigura los estados electrónicos, resultando una estructura de bandas de energía y su densidad de estados correspondiente asociadas con una fase ferromagnética que minimiza la energía total de la aleación FeAs.



Resultados que se contrastan con estudios experimentales que evidencian la existencia de estados fuertemente ferromagnéticos de la aleación FeAs con estructura blanda de cinc reportados en 2021 por (Anh et al., 2021).

6.3 Responsabilidad ética

Se obtuvieron resultados propios sobre los parámetros de estructura electrónica con fase semiconductor y fase ferromagnética de la aleación FeAs. El presente estudio se desarrolló respetando todos los derechos de autoría y además se usó software libre para efectuar los cálculos.



CONCLUSIONES

- a) La estructura electrónica obtenida para $\gamma = 0.0$ presenta una brecha de energía prohibida de 0.248 Ry, que equivale a 3.378 eV que evidencia una aleación de FeAs con fase semiconductor anti ferromagnética. La estructura electrónica obtenida para $\gamma = 0.3$ presenta una estructura de bandas de energía con estados electrónicos fuertemente asociados con una fase ferromagnética, lo que evidencia una posible transición de fase semiconductor a ferromagnética de la aleación FeAs sin cambiar su red cristalina blenda de cinc, que se ajusta a la existencia de magnetorresistencia gigante en aleación de FeAs con estructura blenda de cinc reportado en la literatura de especialidad (Anh et al., 2021).
- b) La energía total de -19.68 Ry obtenida con la estructura electrónica calculada con $\gamma = 0.3$ y asociada con la fase ferromagnética resulto con la energía total mínima. Esto se ajusta con la evidencia en estudios del FeAs reportado en la literatura de especialidad (Griffin & Spaldin, 2014).
- c) El método de los orbitales lineales muffins tin, LMTO, constituye una buena herramienta que se adapta bien para los cálculos de los parámetros de la estructura electrónica en las direcciones de alta simetría de la red cristalina de una aleación como la FeAs.



RECOMENDACIONES

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

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



REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 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
- Anh, L. D., Hai, P. N., & Tanaka, M. (2016). Observation of spontaneous spin-splitting in the band structure of an n-type zinc-blende ferromagnetic semiconductor. *Nature Communications*, 7, 1–8. <https://doi.org/10.1038/ncomms13810>
- Anh, L. D., Hayakawa, T., Nakagawa, Y., Shinya, H., Fukushima, T., Kobayashi, M., Katayama-Yoshida, H., Iwasa, Y., & Tanaka, M. (2021). Ferromagnetism and giant magnetoresistance in zinc-blende FeAs monolayers embedded in semiconductor structures. *Nature Communications*, 12(1), 1–10. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-24190-w>
- Cabrera Arista, C. (2019). *Calculo de la estructura electronica y de la energía total de los sistemas cristalinos de Ge, GaP y SiC* [Universidad Nacional Mayor de San Marcos]. <https://hdl.handle.net/20.500.12672/10748>
- Cabrera, C. (2017). Electronic Structure in crystalline system of Ge, GaP and SiC. *Revista de Investigación de Física, UNMSM*, 20(2), 1–4. <https://revistasinvestigacion.unmsm.edu.pe/index.php/fisica/issue/view/1327>
- Cabrera, C. (2020). Estructura electrónica de aleación AlAs con red zincblende, calculadas con el método LMTO. *Revista de Investigación de Física*, 23(1), 18–23. https://doi.org/fisica.unmsm.edu.pe/rif/previo_files/2020-1/03cabrera.pdf
- Campbell, D. J., Eckberg, C., Wang, K., Wang, L., Hodovanets, H., Graf, D., Parker, D., & Paglione, J. (2017). Quantum oscillations in the anomalous spin density wave state of FeAs. *Physical Review B*, 96(7), 1–8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.075120>
- Domínguez, F. (Universidad C. M. (2001). *Física del Estado Sólido* (M. T. Gomez-Mascaraque (ed.); Paraninfo, pp. 85–87). Thomson Learnig.



- Griffin, S. M., & Spaldin, N. A. (2014). *A density functional theory study of FeAs comparing LDA+U, GGA+U and hybrid functionals.*
<http://arxiv.org/abs/1401.2277>
- Griffin, S. M., & Spaldin, N. A. (2017). A density functional theory study of the influence of exchange-correlation functionals on the properties of FeAs. *Journal of Physics Condensed Matter*, 29(21). <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa6b9a>
- Harrison, W. A. (1960). Band Structure of Aluminum. *Phys. Rev.*, 118(5), 1182–1189. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.118.1182>
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Jackson, J. D. (2021). *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- Kohn, W. (1999). Nobel lecture: Electronic structure of matter - Wave functions and density functional. *Reviews of Modern Physics*, 71(5), 1253–1266. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.1253>
- Kohn, W., Becke, A. D., & Parr, R. G. (1996). Density functional theory of electronic structure. *Journal of Physical Chemistry*, 100(31), 12974–12980. <https://doi.org/10.1021/jp9606691>
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). W. Kohn and LJ Sham, *Phys. Rev.* 140, A1133 (1965). *Phys. Rev.*, 140, A1133.
- MacLaren, J. M., Clougherty, D. P., McHenry, M. E., & Donovan, M. M. (1991). Parameterised local spin density exchange-correlation energies and potentials for electronic structure calculations I. Zero temperature formalism. *Computer Physics Communications*, 66(2–3), 383–391. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(91\)90084-X](https://doi.org/10.1016/0010-4655(91)90084-X)
- Melendez Martinez, J. J. (Universidad de E. (2012). *Física del Estado Sólido* (1st ed.). Coleccion manuales uex-74.
- Nowak, H. J., Andersen, O. K., Fujiwara, T., Jepsen, O., & Vargas, P. (1991). Electronic-structure calculations for amorphous solids using the recursion method and linear muffin-tin orbitals: Application to Fe₈₀B₂₀. *Physical*

- Review B*, 44(8), 3577–3598. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.3577>
- Parr, R. G. (1989). *Density-functional theory of atoms and molecules*.
- Rahman, G., Cho, S., & Cheol Hong, S. (2006a). Magnetic and electronic structures of zinc-blende FeX (X=P, As, Sb) by first principles calculations. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 304(1), 146–148. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2006.02.037>
- Skriver, H. L. (1984). *The LMTO Method* (Vol. 1). Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-81844-8>
- Tanaka, M., Ohya, S., & Nam Hai, P. (2014). Recent progress in III-V based ferromagnetic semiconductors: Band structure, Fermi level, and tunneling transport. *Applied Physics Reviews*, 1(1). <https://doi.org/10.1063/1.4840136>
- Vu, T. N., Nayak, S. K., Nguyen, N. T. T., Alpay, S. P., & Tran, H. (2021). Atomic configurations for materials research: A case study of some simple binary compounds. *AIP Advances*, 11(4). <https://doi.org/10.1063/5.0044180>
- Wang, Zi (Faculteit der Natuurwetenschappen, W. en I. (2009). First-principles electronic structure theory , Graphene calculations. *Transport*.

ANEXOS

Unidades y equivalencias usadas en este trabajo

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

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

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

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

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

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

Siglas usadas

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

FeAs = Símbolo de aleación binaria de hierro-Arsénico.

AFM = Anti Ferromagnético

FM = Ferromagnético.

Zincblende = red cristalina tipo blenda de cinc ó ZnS.

DFT = *Density Functional Theory*

KSE = *Kohn-Sham equation*

LMTO = *Linear Muffin-Tin Orbitals*

DOS = *Density Occupied States*

LDA = *Local Density Approximation*

ASA = *Atomic Sphere Approximation*

FCC = *Face Center Cubic*

ψ_α = función de onda de orbital atómico con número cuántico α

ε_α = auto-valor de energía (en *a.u.*) del orbital con número cuántico α



ANEXOS: MATRÍZ DE CONSISTENCIA

Transición de fase semiconductor a ferromagnética en la estructura electrónica de aleación de Hierro-Arsénico FeAs con red cristalina blenda de cinc

PROBLEMA GENERAL	OBJETIVO GENERAL	HIPOTESIS GENERAL	VARIABLE	INDICADORES	METODOLOGIA A UTILIZAR
¿Se evidenciará una transición de fase semiconductor a ferromagnética en la estructura electrónica de la aleación Hierro-Arsénico FeAs con red cristalina blenda de cinc?	Conocer la estructura electrónica en la red cristalina blenda de cinc de la aleación de Hierro-Arsénico FeAs.	La estructura electrónica permitirá evidenciar una transición de fase semiconductor a ferromagnética de la aleación FeAs.	V. INDEPENDIENTE Vector de onda en las direcciones de alta simetría.	rango de valores	Método LMTO
PROBLEMAS ESPECIFICOS	OBJETIVOS ESPECIFICOS	HIPOTESIS ESPECIFICAS	VARIABLES	INDICADORES	METODOLOGIA A UTILIZAR
¿Se podrá calcular las bandas de energía y la densidad de estados en la red cristalina blenda de cinc de la aleación Hierro-Arsénico FeAs?	Calcular las bandas de energía y la densidad de estados DOS de la aleación Hierro-Arsénico FeAs.	Las bandas de energía y la densidad de estados obtenidas con el método LMTO evidenciaran una transición de fase semiconductor a ferromagnética de la aleación FeAs.	La energía en las direcciones de alta simetría de la red cristalina.	Rango de valores	Método LMTO
¿Se podrá conocer la energía total asociada a la transición de fase semiconductor a ferromagnética de la aleación FeAs?	calcular la energía total asociada a una transición de fase semiconductor a ferromagnética de la aleación FeAs con red cristalina blenda de cinc.	La energía total del estado fundamental ferromagnético será de mayor estabilidad	La energía total del estado fundamental del sistema.	Rango de valores	Método de integración de Simpson

