

# Tarea Final

## Propiedades del GaAs

Nieto Castellanos Jaime Fabián, Rave Franco Geovanny Alexander.

### 1. Introducción

El Arseniuro de galio (GaAs) es un material semiconductor tipo III-V compuesto de partes iguales de galio y arsénico (Schlesinger, 2001)<sup>1</sup>. El GaAs tiene una estructura cristalina sin simetría de inversión, es decir, pertenece al grupo puntual  $T_d$ , lo que se conoce como estructura tipo Zincblenda (Kuwata-Gonokami, 2011; Poole y Darwazeh, 2016), con los átomos de galio y arsénico, en donde cada conjunto de átomos está ocupando los sitios de una de las dos subredes F.C.C. que hacen a la red, en donde cada átomo de arsénico tiene cuatro átomos de galio como primeros vecinos y cada átomo de galio cuatro átomos de arsénico como vecinos, arreglados en una estructura tetraédrica. Este cristal ha ganado importancia desde 1970 como una alternativa al silicio para la creación de circuitos integrados pues los electrones viajan cinco veces más rápido en GaAs que en silicio. También ha mostrado ser un excelente material para la creación de celdas solares pues posee un *bandgap* amplio que lo dota de una mejor absorción de fotones y una densidad de potencia de alto rendimiento mostrando así una mayor facilidad de convertir energía solar en energía eléctrica, más que cualquier otro material en condiciones normales, y no solamente eso, sino también en condiciones con poca luz o con mucho calor ha mostrado una mayor efectividad. El problema con el arseniuro de galio es que el material es excepcionalmente difícil de cultivar en cristales grandes y sin defectos (Whitesides, 1988).

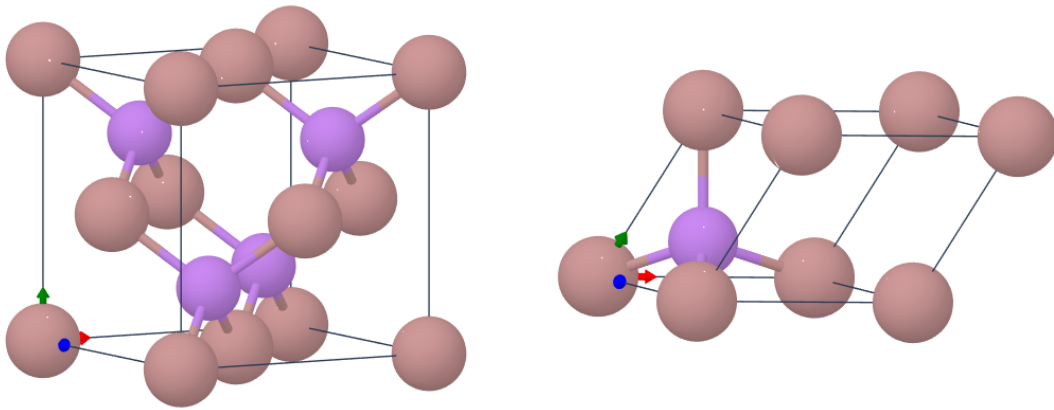


Figura 1: La imagen de la Izquierda es la estructura del GaAs con la celda cúbica y la derecha con la F.C.C. El color morado representa a los átomos de arsénico y los lila del galio. Obtenido de: <https://materialsproject.org/#apps/xtaltoolkit/%7B%22input%22%3A0%2C%22materialIDs%22%3A%22mp-2534%22%7D>

<sup>1</sup>Es decir, cuyos constituyentes se encuentran en los grupos III y V de la tabla periódica.

## 2. Estructura Cristalina

Como se mencionó previamente, el GaAs posee una estructura del tipo zincblenda, la cual puede ser descrita a través de una red F.C.C. con los vectores:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a_0}{2}(1, 1, 0) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a_0}{2}(0, 1, 1) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a_0}{2}(1, 0, 1) \\ a_0 &= 5.65325 \text{ \AA}\end{aligned}$$

y la base atómica (en coordenadas relativas a la red F.C.C.):

$$\begin{aligned}\vec{d}_1 &= (0, 0, 0) \\ \vec{d}_2 &= \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)\end{aligned}$$

$d_1$  corresponde al átomo de galio, mientras que  $d_2$  corresponde al átomo de arsénico. La base recíproca de una red F.C.C. es una red B.C.C. y se obtiene usando  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ :

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a_0}(1, 1, -1) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a_0}(-1, 1, 1) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a_0}(1, -1, 1)\end{aligned}$$

Ahora bien, para poder obtener el espectro de difracción de rayos x, es necesario recordar un par de conceptos importantes. Primero, recordemos que la distancia entre dos planos cristalográficos está dada por:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}, \quad (1)$$

donde  $h, k, l$  son los índices de Miller y  $\vec{G}_{hkl}$  es el vector ortogonal a los planos, que se obtiene a través de la relación  $\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  con  $b_i$  los vectores de la base recíproca. Esta distancia puede ser obtenida a su vez usando la Ley de Bragg:

$$d = \frac{m\lambda}{2\sin\theta}, \quad (2)$$

donde  $m \in \mathbb{N}$ ,  $\theta$  es el ángulo de difracción y  $\lambda$  es la longitud de onda de los rayos x; para difracción a primer orden se toma  $m = 1$ . De las ecuaciones (1) y (2), se puede despejar el ángulo de difracción en términos de  $|\vec{G}_{hkl}|$ , lo cual permite conocer los ángulos de difracción para distintos planos cristalográficos.

$$\theta_{hkl} = \arcsin\left(\frac{\lambda|\vec{G}_{hkl}|}{4\pi}\right) \quad (3)$$

Una observación importante es que  $\vec{G}_{hkl}$  debe calcularse usando la base recíproca de la celda unitaria, cuya red es (para el caso de GaAs):

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a_0(1, 0, 0) \\ \vec{a}_2 &= a_0(0, 1, 0) \\ \vec{a}_3 &= a_0(0, 0, 1) \\ a_0 &= 5.65325 \text{ \AA},\end{aligned}$$

i.e. la red de una estructura cúbica simple:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a_0}(1, 0, 0) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a_0}(0, 1, 0) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a_0}(0, 0, 1).\end{aligned}$$

En este caso, la base atómica no puede ser descrita mediante únicamente dos átomos, es necesario considerar a todos los de la celda unitaria. Tomando en cuenta que la estructura del GaAs es la misma que la de zincblenda, la cual corresponde a dos redes F.C.C. intercaladas, una para cada especie atómica (la segunda red F.C.C. está desplazada  $\frac{1}{4}$  sobre la diagonal de la celda unitaria), se tienen en total ocho átomos en la base atómica, cuyas posiciones en coordenadas relativas a la red de la celda unitaria son:

$$\begin{aligned}\vec{d}_1 &= (0, 0, 0) & \vec{d}_2 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) & \vec{d}_3 &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & \vec{d}_4 &= \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \\ \vec{d}_5 &= \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) & \vec{d}_6 &= \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right) & \vec{d}_7 &= \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right) & \vec{d}_8 &= \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right).\end{aligned}$$

Los primeros cuatro vectores corresponden a los átomos de galio, mientras que los cuatro últimos corresponden al arsénico.

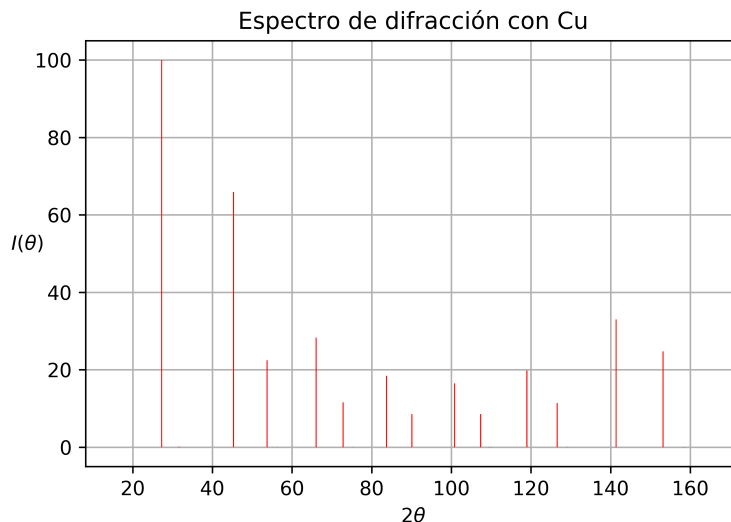
Para calcular la intensidad del espectro de difracción en cada  $\theta_{hkl}$ , es necesario calcular el factor de estructura mediante:

$$S_G = \sum_j e^{-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} \int d\vec{\rho} n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{\rho}}, \quad (4)$$

$j$  corre sobre cada elemento de la base atómica,  $\vec{\rho}$  es la coordenada relativa  $\vec{r} - \vec{r}_j$  con  $r_j$  la coordenada del  $j$ 'ésimo átomo de la base y  $n_j$  la densidad atómica. A la integral que aparece en la suma anterior se le denomina factor atómico, usualmente depende del ángulo de difracción, no obstante puede aproximarse por el número atómico  $z$  de la especie atómica. La intensidad del espectro es proporcional a  $|S_G|^2$ , de acuerdo a (Lee, Montoya, Singh, y Tanasa, 2001), el factor de proporcionalidad es  $p \frac{1 + \cos^2 2\theta_{hkl}}{\sin^2 \theta_{hkl} \cos \theta_{hkl}}$ , con  $p$  un factor de multiplicidad, que tomaremos como  $p = 1$ . Entonces:

$$I = |S_G|^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta_{hkl}}{\sin^2 \theta_{hkl} \cos \theta_{hkl}} \quad (5)$$

A través de las ecuaciones descritas, se obtuvo el espectro de difracción de rayos x del GaAs eligiendo  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ , correspondiente al cobre. A continuación se muestra el espectro obtenido mediante nuestro programa y se hace una comparación con el espectro que se encuentra en (Persson, 2014).



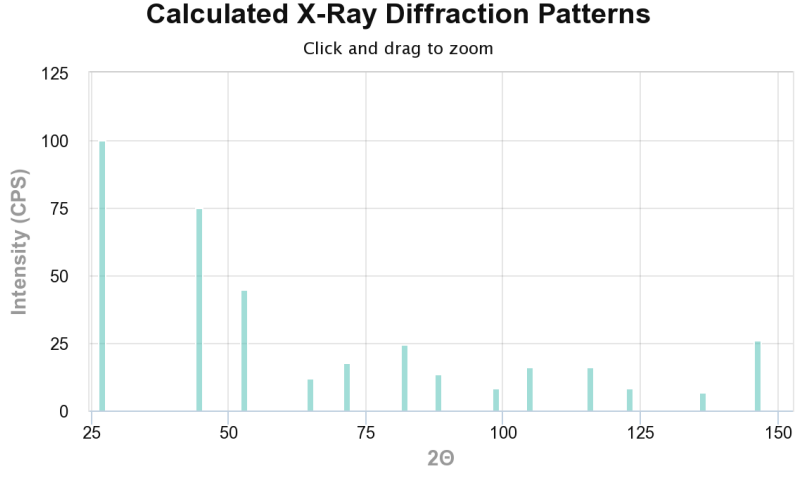


Figura 2: Ambos espectros se encuentran normalizados, tomando como 100 el valor más alto de la intensidad. El código se anexa el .rar con el nombre de EspectroRayosX.

Se observa un alto parecido entre ambos espectros, las diferencias que hay se deben, posiblemente, a la aproximación del factor de forma atómico.

### 3. Estructura electrónica

El modelo de amarre fuerte, usando la aproximación de Born-Oppenheimer y un potencial periódico con periodicidad de la red, consiste en expandir los estados del cristal en combinaciones lineales de los orbitales atómicos. De la ecuación de Schrödinger y de la expansión de la función de onda del cristal en términos de los estados, tenemos que los eigenvalores y los eigenvectores del cristal se obtienen de la ecuación de compatibilidad

$$||M_{ij}(\mathbf{k}) - ES_{ij}(k)|| = 0, \quad (6)$$

en donde  $M_{ij}$  son los elementos de matriz del hamiltoniano del cristal y  $S_{ij}$  los elementos de la matriz de traslape, los cuales de manera explícita son

$$M_{ij}(\mathbf{k}) = \langle \Phi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | H | \Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle \quad (7)$$

$$S_{ij}(\mathbf{k}) = \langle \Phi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | \Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle. \quad (8)$$

En el modelo semi empírico se adoptan otras suposiciones más drásticas sobre los elementos del hamiltoniano y la matriz de traslape, explícitamente, considerando la invarianza traslacional del hamiltoniano, quedándonos a primeros vecinos y que  $\Phi_i(\mathbf{r})$  es eigenfunción del hamiltoniano atómico con eigenvalor asociado  $E_i$ , tenemos

$$S_{ij} = \delta_{ij} \quad (9)$$

$$M_{ij} = E_i \delta_{ij} + \sum_{\vec{\delta}_n} e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_n} \int \phi_i^*(\mathbf{r}) V_a(\mathbf{r} - \vec{\delta}_n) \phi_j(\mathbf{r} - \vec{\delta}_n) d\mathbf{r} \quad (10)$$

en donde  $\vec{\delta}_n$  es la posición del  $n$ 'ésimo vecino y  $V_a$  la contribución del átomo en el origen. En el caso de solamente orbitales s y p, las integrales de  $M_{ij}$  son

$$\int \phi_s^*(\mathbf{r}) V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{r} = V_{ss\sigma} \quad (11)$$

$$\int \phi_s^*(\mathbf{r}) V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_{p_i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{r} = l_i V_{sp\sigma} \quad (12)$$

$$\int \phi_{p_i}^*(\mathbf{r}) V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_{p_i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{r} = l_i^2 V_{pp\sigma} + (1 - l_i^2) V_{pp\pi} \quad (13)$$

$$\int \phi_{p_i}^*(\mathbf{r}) V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_{p_j}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{r} = l_i l_j [V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}] \quad (14)$$

Con  $\mathbf{R}/|\mathbf{R}| = |(l_x, l_y, l_z)|$  los cosenos directores del vector de distancia de la aproximación de dos centros, y los valores  $V_{ijk}$  los parámetros de Slater-Koster (Grosso, 2013). Estos parámetros se determinan de manera empírica y son útiles porque a través de ellos se pueden calcular los elementos de matriz del hamiltoniano, para diagonalizarlo y obtener la estructura de bandas. Ahora bien, para aplicar esto al caso del GaAs, como son dos átomos, la integral (12) será distinta con base en el traslape de los orbitales de cada átomo, como GaAs tiene dos especies atómicas, se tiene que:

$$\langle \phi_s^{Ga} | V_a | \phi_{p_i}^{As} \rangle = l_i V_{sp\sigma}^{(1)} \quad (15)$$

$$\langle \phi_{p_i}^{Ga} | V_a | \phi_s^{As} \rangle = -l_i V_{sp\sigma}^{(2)}. \quad (16)$$

Las demás integrales permanecen intactas. Además, las energías  $E_s^{Ga} \neq E_s^{As}$ ,  $E_p^{Ga} \neq E_p^{As}$ . A continuación se muestran las energías de sitio y los parámetros de Slater-Koster obtenidas de (Boykin, Klimeck, Bowen, y Oyafuso, 2002).

Parámetros	[eV]
$E_s^{Ga}$	-5.500420
$E_p^{Ga}$	4.151070
$E_s^{As}$	-0.241190
$E_p^{As}$	6.707760
$V_{sp\sigma}^{(1)}$	2.664930
$V_{sp\sigma}^{(2)}$	2.960320
$V_{ss\sigma}$	-1.645080
$V_{pp\sigma}$	4.150800
$V_{pp\pi}$	-1.427440

Tabla 1: Parámetros de Slater-Koster y energías de sitio

Se trabajó con aproximación a primeros vecinos, considerando únicamente orbitales  $s$  y  $p$ . Las posiciones de los primeros vecinos en la base atómica son (coordenadas relativas a la red F.C.C.):

$$\begin{aligned} \vec{v}_1 &= \frac{a}{4}(1, 1, 1) & \vec{v}_2 &= \frac{a}{4}(-1, 1, -1) \\ \vec{v}_3 &= \frac{a}{4}(1, -1, -1) & \vec{v}_4 &= \frac{a}{4}(-1, -1, 1) \end{aligned}$$

Se graficó la estructura de bandas a través del camino de alta simetría  $L\Gamma XU, K\Gamma$ ; en coordenadas relativas a la base recíproca de la red F.C.C:

$$\begin{aligned} \Gamma &= (0, 0, 0) & K &= \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{4}, \frac{3}{8}\right) & L &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ U &= \left(\frac{1}{4}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}\right) & W &= \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}\right) & X &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

A continuación se muestra la estructura de bandas.

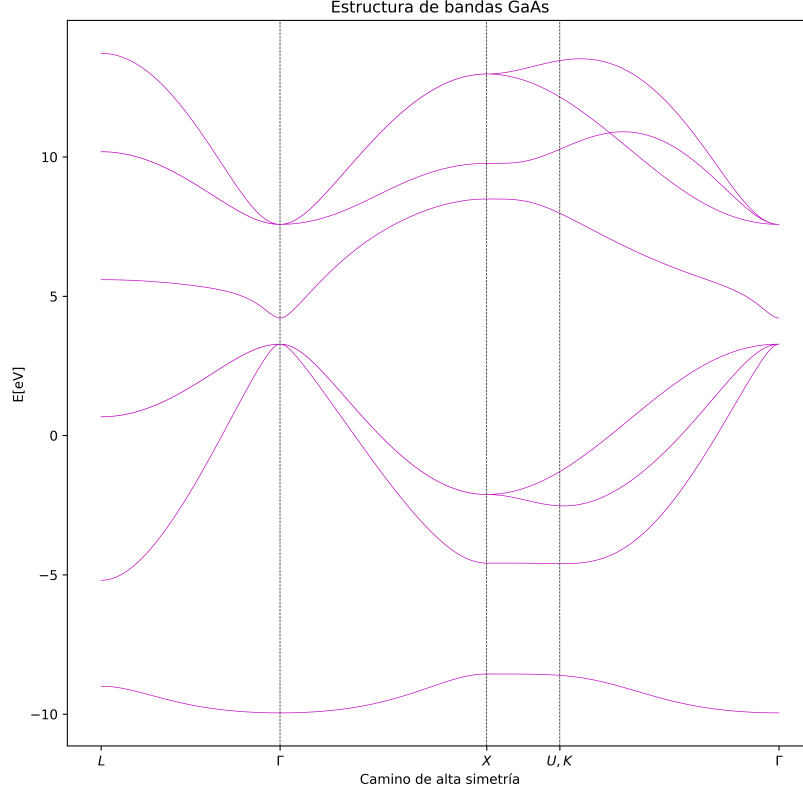


Figura 3: Se anexa el código para calcular esta estructura de bandas a través del modelo de enlace fuerte.

## 4. Estructura de bandas de fonones

Para estudiar la dinámica de una red en tres dimensiones, se parte de la aproximación armónica, que consiste en aproximar la energía del estado base en función de los desplazamientos  $u_n$  alrededor del punto de equilibrio hasta segundo orden, con lo cual se obtiene:

$$E_0(\vec{u}_{n\nu}) = \frac{1}{2} \sum_{n\nu\alpha, m\mu\beta} D_{n\nu\alpha, m\mu\beta} \vec{u}_{n\nu\alpha} \vec{u}_{m\mu\beta} \quad (17)$$

Donde  $\alpha, \beta = x, y, z$ ;  $\nu, \mu = 1, 2, \dots, n_b$  con  $n_b$  los átomos de la base y  $n, m = 1, 2, \dots, N$  con  $N$  las celdas del cristal. La matriz  $D_{n\nu\alpha, m\mu\beta}$  de las constantes de fuerza. Se proponen las siguientes soluciones para los vectores de desplazamiento:

$$\vec{u}_{n,\nu} = \vec{A}_\nu(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R}_n - \omega t)} \quad (18)$$

con  $\vec{A}_\nu(\vec{q}, \omega)$  los vectores de polarización,  $\vec{q}$  el vector de onda. A partir de esto, se obtiene la siguiente ecuación secular:

$$|D_{\nu\alpha, \mu\beta}(\vec{q}) - M_\nu \omega^2 \delta_{\alpha, \beta} \delta_{\nu, \mu}| = 0 \quad (19)$$

La solución a esta ecuación da los modos normales de vibración del cristal, los cuales se denominan fonones. Existen dos tipos de modos normales, aquellos para los cuales  $\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \omega = 0$  se llaman ramas acústicas y tienen la característica de que los átomos en la celda unitaria vibran en fase y con la misma amplitud. Por otro lado, existen las ramas ópticas, que son aquellas cuyos átomos se desplazan de forma tal que el centro de masa no se altera. A su vez se pueden clasificar las ramas en longitudinales y transversales.

En la siguiente figura se muestra la banda de fonones para el GaAs, obtenida en (Petretto y cols., 2018). Además, se muestran explícitamente las bandas ópticas y las bandas acústicas.

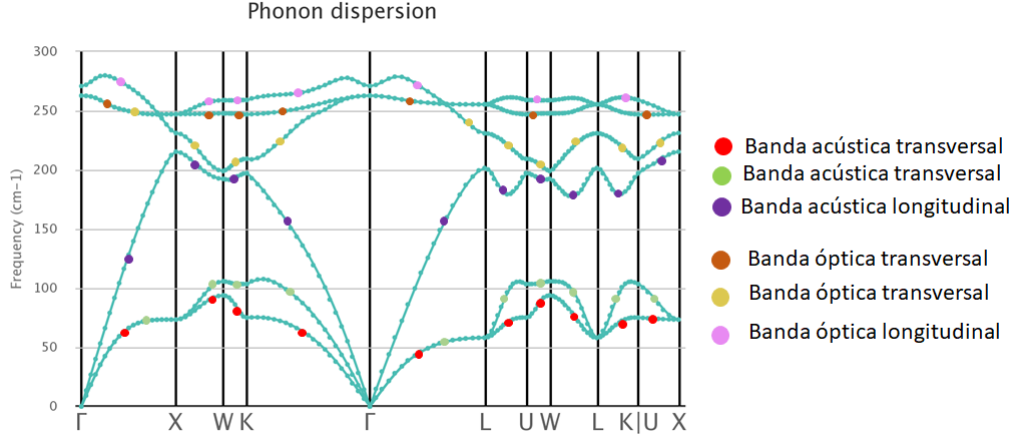


Figura 4

La temperatura de Debye  $T_D$  es la temperatura más alta que un sólo modo de vibración de la red puede alcanzar, esta relaciona las propiedades elásticas con las termodinámicas como lo son fonones, expansión térmica, conductividad térmica, calor específico y entalpía de la red (Li y Wang, 2012).

Para calcular la temperatura de Debye recordemos que esta puede obtenerse a través de:

$$T_D = \frac{h}{k_B} \left( \frac{3}{4\pi} \frac{N}{V} \right)^{1/3} v_s \quad (20)$$

Donde  $V$  es el volumen de la celda unitaria. Recordando que el arseniuro de galio tiene ocho átomos en la celda unitaria, se puede calcular la densidad atómica de la siguiente forma:

$$\frac{N}{V} = \frac{8}{a^3} = 4.42 \times 10^{28} \frac{\text{átomos}}{m^3} \quad (21)$$

De acuerdo a (Blakemore, 1982) , la velocidad del sonido  $v_s$  depende de la dirección del vector de propagación y de la temperatura. En la siguiente tabla se muestra  $v_s$  longitudinal y transversal para distintas direcciones de propagación en el material, las cuales se denotan por los índices de Miller  $[hkl]$

Dirección de propagación	Velocidad longitudinal o transversal	[m/s]
[100]	$v_L$	4731
[100]	$v_T$	3345
[110]	$v_L$	5238
[110]	$v_{T  }$	3345
[110]	$v_{T\perp}$	2476
[111]	$v_L$	5397
[111]	$v_T$	2796

Tabla 2: Velocidad del sonido en diferentes direcciones a  $T=300K$

Se observa que la velocidad es diferente para distintas direcciones de propagación de la onda de sonido, por lo cual el material presenta anisotropía. Una forma de intentar resolver el problema de quién es la velocidad del sonido correcta para poder ser utilizada en la ecuación (20), es promediar todas las velocidades en las distintas direcciones, las cuales se muestran en la tabla 2. Esto da como resultado una velocidad de:

$$\bar{v}_s = 3903 m/s \quad (22)$$

Usando esta velocidad se obtiene  $T_D = 411.19K$ . Se puede hacer la comparación con la siguiente gráfica empírica que se encuentra en (Madelung, Rössler, y Schulz, 2002):

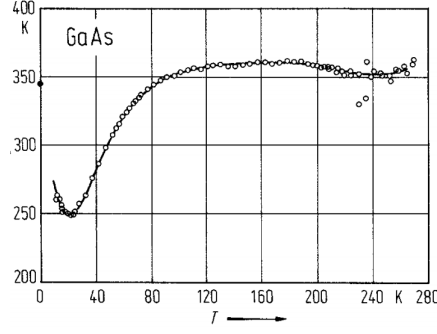


Figura 5:  $T_D$  vs.  $T$

A  $T = 300K$ ,  $T_D \approx 360K$

Dado que el material es anisotrópico como se puede observar de la Tabla 2, tenemos que buscar otra forma de calcular la temperatura de Debye debido a la anisotropía. Esto se puede hacer con base en el módulo de compresibilidad  $B$  y el módulo de elasticidad transversal  $G$  como se puede ver de (Liu y Fan, 2018), en donde la temperatura de Debye es

$$T_D = \frac{h}{k_B} \left( \frac{3}{4\pi} \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} v_m \quad (23)$$

en donde ahora

$$v_m = \left( \frac{2/v_s^3 + 1/v_p^3}{3} \right)^{-\frac{1}{3}} \quad v_s = \sqrt{\frac{G_x}{\rho}} \quad v_p = \sqrt{\frac{B_x + \frac{4}{3}G_x}{\rho}} \quad (24)$$

en donde la  $x$  indica el modelo con el que se calcula, ya sea Reuss, Voigt o Hill, en donde, de manera explícita, están dados por

$$B_{\text{Reuss}} = B_{\text{Voight}} = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (25)$$

$$G_{\text{Voight}} = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (26)$$

$$G_{\text{Reuss}} = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (27)$$

$$B_{\text{Hill}} = \frac{1}{2} (B_{\text{Reuss}} + B_{\text{Voight}}) \quad (28)$$

$$G_{\text{Hill}} = \frac{1}{2} (G_{\text{Reuss}} + G_{\text{Voight}}) \quad (29)$$

con  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  y  $C_{44}$  las constantes elásticas del cristal. Para GaAs estas son (Blakemore, 1982)

$$C_{11} = 119 \pm 0.110^9 Pa \quad C_{12} = 53.8 \pm 0.110^9 Pa \quad C_{44} = 59.5 \pm 0.110^9 Pa \quad (30)$$

a  $300K$ . Entonces, con estos valores la temperatura de Debye de acuerdo a los modelos de Reuss, Voight y Hill son

$$\text{Reuss: } 429.123K \quad (31)$$

$$\text{Voight: } 430.027K \quad (32)$$

$$\text{Hill: } 429.582K \quad (33)$$

## 5. Respuesta Óptica

Un campo eléctrico induce una polarización  $\vec{P}$  en un material, la cual puede ser descrita de manera general a través de la relación:

$$P_i(\vec{r}', t') = \int \chi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') d\vec{r} dt, \quad (34)$$



donde  $\chi_{ij}$  se llama el tensor de susceptibilidad eléctrico (el índice  $j$  se suma). A partir de este tensor dieléctrico:

$$\varepsilon_{ij} = 1 + \chi_{ij}(\vec{q}, \omega) \quad (35)$$

con  $\vec{q}$  el vector de onda. Este tensor es en general complejo y satisface que:

$$\varepsilon(-\vec{q}, -\omega) = \varepsilon^*(\vec{q}, \omega) \quad (36)$$

$$\varepsilon_{ij}(\vec{q}, \omega) = \varepsilon_{ji}(-\vec{q}, \omega) \quad (37)$$

Suponiendo que la longitud de onda de la luz es mucho mayor que la escala del cristal (parámetro de red, etc.), podemos asumir que el vector de onda  $\vec{q} \rightarrow 0$ . Esto implica que el medio tiene una respuesta local al campo eléctrico, es decir, es proporcional a  $\delta(\vec{r})$ . Al tener las propiedades (36), (37), y asumiendo que la naturaleza del tensor  $\varepsilon_{ij}$  es tal que permite describir a este tensor como un escalar complejo, se puede probar que la parte real ( $\varepsilon_1$ ) y la parte imaginaria ( $\varepsilon_2$ ) satisfacen las relaciones de Kramers-Kronig:

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (38)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \omega \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (39)$$

Por otro lado, el hamiltoniano que describe la interacción entre un campo electromagnético y los estados de Bloch es en una aproximación semiclásica, en donde el campo electromagnético se trata de manera clásica y los electrones de manera cuántica, por lo que el hamiltoniano se puede escribir como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{m} \hat{A} \cdot \hat{p} \quad (40)$$

en donde  $\hat{H}_{cR} = \frac{e}{m} \hat{A} \cdot \hat{p}$ .

Sin embargo, nos interesa principalmente las propiedades ópticas lineales, es decir, la respuesta lineal a campos externos.

Sean  $|v\rangle$  y  $|c\rangle$  los estados de un electrón en la banda de valencia y de conducción, respectivamente, con vectores de onda  $\vec{k}_c$  y  $\vec{k}_v$ , de esta forma, en la aproximación de dipolo eléctrico,  $\vec{k}_v = \vec{k}_c$ , podemos escribir el valor de expectación de la parte eléctrica del hamiltoniano como

$$|\langle c | H_{cR} | v \rangle|^2 = \left( \frac{e}{m\omega} \right)^2 \left| \frac{E(\omega)}{2} \right|^2 |P_{cv}|^2 \quad (41)$$

Por lo que la respuesta óptica está caracterizada por la función respuesta del sistema, las cuales están dadas por

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{2\pi e^2}{m\omega} \right)^2 \sum_{\vec{k}} |P_{cv}|^2 \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) \quad (42)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{m} \left[ \sum_{\vec{k}} \left( \frac{2}{m\hbar\omega_{cv}} \right) \frac{|P_{cv}|^2}{\omega_{cv}^2 - \omega^2} \right] \quad (43)$$

en donde  $\varepsilon_1$  se calcula a partir de la  $\varepsilon_2$  con las relaciones Kramers-Kronig y

$$f_{cv} = \frac{2|P_{cv}|^2}{m\hbar\omega_{cv}} \quad (44)$$

es la fuerza de oscilador, la cuál haremos uno, y  $\hbar\omega_{cv} = E_c - E_v$ . La suma sobre  $\vec{k}$  es en la zona de Brillouin. Para calcular numéricamente  $\varepsilon_1$  debemos aproximar la delta por alguna función, en este caso, lo haremos con una gaussiana con una  $\sigma$  pequeña, por lo que, usando esta aproximación y haciendo la fuerza del oscilador igual a uno, nos queda.

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{2\pi e}{m\omega} \right)^2 \sum_{\vec{k}} \frac{m}{2} (E_c - E_v) \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E_c - E_v - \hbar\omega)^2}{2\sigma^2}} \quad (45)$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 m} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega_{cv}^2 - \omega^2} \quad (46)$$

Por lo tanto, considerando que, a partir de la estructura de bandas, la banda de valencia y la banda de conducción son (obtenidas con el programa de la sección anterior)

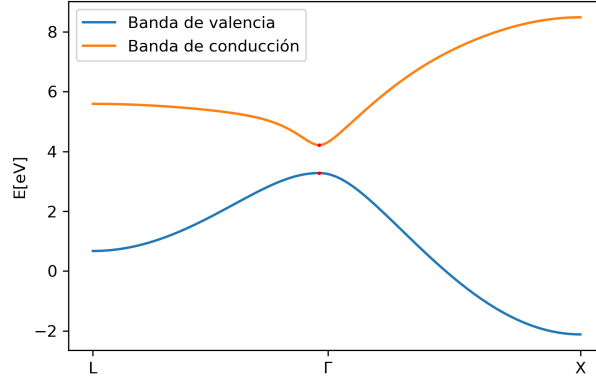


Figura 6: Banda de valencia y banda de conducción

obtenemos que, la respuesta óptica con base en las ecuaciones (45) y (46) son

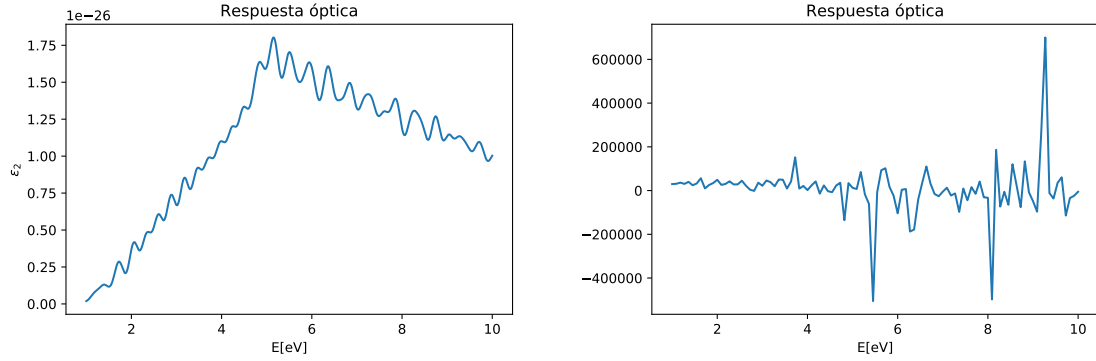


Figura 7: Respuesta óptica lineal del GaAs respecto a  $\hbar\omega$

Finalmente, con la energía de la banda de valencia y la banda de conducción, se puede calcular la densidad conjunta de estados, la cual viene dada por

$$D_j(E_{cv}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{dS_k}{|\nabla_k E_{cv}|} \quad (47)$$

en donde  $E_{cv} = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k})$  y  $dS_k$  es la diferencial de superficie definida por  $E_{cv}(\vec{k}) = cte$ .

## Referencias

- Blakemore, J. S. (1982, oct). Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. *Journal of Applied Physics*, 53(10), R123–R181. doi: 10.1063/1.331665
- Boykin, T. B., Klimeck, G., Bowen, R. C., y Oyafo, F. (2002, sep). Diagonal parameter shifts due to nearest-neighbor displacements in empirical tight-binding theory. *Physical Review B*, 66(12). doi: 10.1103/physrevb.66.125207
- Grosso, G. (2013). Solid state physics. En (pp. 182–185). Elsevier LTD, Oxford.
- Kuwata-Gonokami, M. (2011). High-density excitons in semiconductors. En *Comprehensive semiconductor science and technology* (pp. 213–255). Elsevier. doi: 10.1016/b978-0-44-453153-7.00080-8
- Lee, J., Montoya, J., Singh, B., y Tanasa, C. (2001, marzo). “real” semiconductor project gaas. Descargado de <https://ocw.mit.edu/courses/electrical-engineering-and-computer-science/6-730-physics-for-solid-state-applications-spring-2003/projects/ProjP11.pdf>
- Li, C., y Wang, Z. (2012). Computational modelling and ab initio calculations in MAX phases – i. En *Advances in science and technology of mn1axn phases* (pp. 197–222). Elsevier. doi: 10.1533/9780857096012.197

- Liu, X., y Fan, H.-Q. (2018, jun). Electronic structure, elasticity, debye temperature and anisotropy of cubic WO<sub>3</sub> from first-principles calculation. *Royal Society Open Science*, 5(6), 171921. doi: 10.1098/rsos.171921
- Madelung, O., Rössler, U., y Schulz, M. (Eds.). (2002). *Gallium arsenide (gaas), debye temperature, density, heat capacity, melting point: Datasheet from landolt-börnstein - group iii condensed matter · volume 41a1β: “group iv elements, iv-iv and iii-v compounds. part b - electronic, transport, optical and other properties” in springer materials* ([https://doi.org/10.1007/10832182\\_226](https://doi.org/10.1007/10832182_226)). Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Descargado de [https://materials.springer.com/lb/docs/sm\\_lbs\\_978-3-540-31356-4\\_226](https://materials.springer.com/lb/docs/sm_lbs_978-3-540-31356-4_226) (Copyright 2002 Springer-Verlag Berlin Heidelberg) doi: 10.1007/10832182\_226
- Persson, K. (2014). *Materials data on gaas (sg:216) by materials project*. LBNL Materials Project; Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, CA (United States). doi: 10.17188/1200591
- Petretto, G., Dwaraknath, S., Miranda, H. P., Winston, D., Giantomassi, M., van Setten, M. J., . . . Rignanese, G.-M. (2018, may). High-throughput density-functional perturbation theory phonons for inorganic materials. *Scientific Data*, 5(1). doi: 10.1038/sdata.2018.65
- Poole, C., y Darwazeh, I. (2016). Microwave semiconductor materials and diodes. En *Microwave active circuit analysis and design* (pp. 355–393). Elsevier. doi: 10.1016/b978-0-12-407823-9.00011-1
- Schlesinger, T. (2001). Gallium arsenide. En *Encyclopedia of materials: Science and technology* (pp. 3431–3435). Elsevier. doi: 10.1016/b0-08-043152-6/00612-4
- Whitesides, G. M. (1988). Materials for advanced electronic devices. En M. A. Good (Ed.), *Biotechnology and materials science: Chemistry for the future* (p. 85-99). Washington: American Chemical Society. (238)