

Cálculos de primeros principios de las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos arsénicos XAs (X=In, Al, Sc)

First Principles calculations of structural and electronic properties of Arsenic compounds XAs (X=In, Al, Sc)

Simón Nicolas G.¹ y López Pérez William¹

Resumen. Reportamos un estudio teórico de las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos InAs, AlAs y ScAs. Hemos, realizado cálculos de primeros principios, basados en la Teoría del Funcional Densidad (DFT) y con la ayuda del paquete numérico wien2k, en el cual se implementa el método de las ondas planas aumentadas y linealizadas con potencial completo (FP-LAPW) para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham. Calculamos los efectos de intercambio y correlación con tres parametrizaciones distintas de la aproximación de gradiente generalizado (GGA). Nuestros resultados muestran que la estructura Zinc Blenda es la fase estable de los compuestos InAs y AlAs, mientras que para el compuesto ScAs, es NaCl. Los valores de volumen y energía de equilibrio, obtenidos con la parametrización de Wu-Cohen, son más cercanos a los datos experimentales. Se observó un carácter semiconductor en los compuestos AlAs y InAs, mientras que el ScAs muestra un carácter metálico.

Palabras clave: Primeros principios, DFT, LDA, Wu-Cohen, PBE, propiedades estructurales y electrónicas.

Abstract. We report a theoretical study of structural and electronic properties of InAs, AlAs, ScAs compounds, in the volume. We carry out first principles calculation using density functional theory (DFT) and package wien 2k which one implements, the Full – Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP – LAPW) method in order to

¹ GFMC. Departamento de Física. Universidad del Norte, A. A. 1569, Barranquilla. Correo electrónico: &nsimon@egresado.uninorte.edu.co ; \$wlopez@uninorte.edu.co

solve Kohn-Sham equations. Exchange and correlation effects have been investigated with three different parameterizations from GGA. The total energy curves calculated for ZB, NaCl, CsCl, NiAs and wurtzite phases show that ZB structure is found to have the lowest energy at the theoretical equilibrium volume for InAs and AlAs while NaCl is for ScAs. The energy and volume equilibrium values obtained with the Wu-Cohen parameterization agree well with experimental data. Besides, the electronic properties obtained show that AlAs and InAs compounds are semiconductors in their crystallization phase of ground state, while ScAs shows a metallic character.

Key words: Wu-Cohen, PBE, First Principles, DFT, Structural and Electronic Properties.

1. INTRODUCCIÓN

A la hora de hacer un análisis de cualquier compuesto, en cualquiera de los estados de la materia, la comprensión a nivel atómico de la estructura del material juega un papel muy importante. Actualmente, en estudios teóricos o experimentales que involucran la caracterización de un material, es muy poco probable que se conozca de manera precisa las posiciones de los átomos en el material que se analiza (Winkler *et al.*, 1999); la importancia de esas posiciones, según la física cuántica (Foresman *et al.*, 1995) se debe a que la determinación de las propiedades de interés, en todo estudio de caracterización, depende en gran medida de la geometría formada por los átomos del material (Bautista-Hernandez *et al.*, 2003).

Con la acelerada evolución de la sociedad que se vive a nivel global, la implementación que responda en forma eficiente y versátil a una necesidad específica, ha incentivado el desarrollo de numerosas investigaciones en el campo de la física de los materiales. El objetivo de dichas investigaciones es obtener compuestos que brinden un rendimiento más eficaz que los que actualmente están vigentes en los diferentes ámbitos de la ciencia y la tecnología. Los compuestos de los grupos III-V siempre han sido atractivos como objeto de estudio por sus potenciales aplicaciones, principalmente para la construcción de dispositivos electrónicos, como sensores, emisores de luz y foto detectores, entre otros, que hoy constituyen la base de muchos dispositivos empleados en la electrónica moderna (Ahmed *et al.*; 2007). En este grupo se destaca el Arseniuro de Galio (GaAs) que por sus características es empleado, entre otros usos, en aplicaciones de radiometría (Aja; 2006) y construcción de celdas solares (Barrera *et al.*; 2007).

En este trabajo mostraremos y analizaremos los resultados de la caracterización teórica los compuestos binarios arsénicos AlAs, InAs y ScAs.

2. METODOLOGÍA

Los cálculos de primeros principios, para los elementos arsénicos analizados en este estudio, fueron desarrollados sobre la base de la Teoría de Funcional Densidad (DFT) (Hohenberg *et al.*; 1964). Los efectos de intercambio y correlación los ajustamos mediante la aproximación de gradiente generalizado (GGA) con las parametrizaciones de Wu-Cohen (WC) (Wu *et al.*; 2006), Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) (Perdew *et al.*; 1996) y la Aproximación de Densidad Local (LDA) (Kohn *et al.*; 1965). Para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham, adoptamos el método de las ondas planas aumentadas y linealizadas (FP-LAPW) implementado en el paquete numérico wien2k (Blaha *et al.*; 1999).

3. ANÁLISIS Y RESULTADOS

Inicialmente, presentaremos y analizaremos los resultados obtenidos para el Arseniuro de Indio (InAs); haremos mayor énfasis en las propiedades obtenidas con la parametrización de Wu-Cohen, dado que presentó mejor concordancia con los resultados teóricos y experimentales, reportados previamente por otros autores (Madelung *et al.*, 1982).

La figura 1 permite comparar las energías y volúmenes de equilibrio de las diferentes fases cristalinas, consideradas para el análisis del compuesto binario InAs, y obtenidas con el potencial Wu-Cohen. La fase estructural más estable, hallada en los tres potenciales, es la Zinc Blenda (ZB) debido a que presenta un mínimo de energía más bajo, respecto de las otras fases analizadas. Esta estructura tiene mayor relevancia sobre las demás fases cristalinas consideradas, porque determina el carácter general del compuesto InAs, ya que corresponde al estado de cristalización natural o estado base. Las energías y volúmenes fueron reportadas por fórmula unidad de InAs.

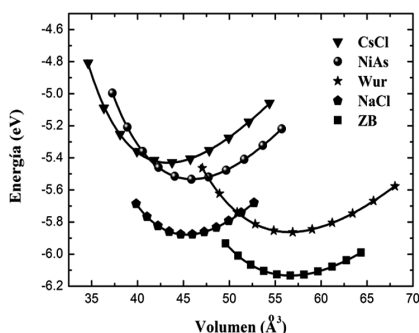


Figura 1. Energía versus volumen para las cinco estructuras de InAs estudiadas con el potencial Wu-Cohen. Los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan.

En la figura 1, los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan (Murnaghan *et al.*; 1944). El cero de la energía se ha elegido como la suma de las energías de los átomos de Indio (In) y Arsenico (As) aislados.

En la figura 2 observamos que la energía más baja para la estructura del estado base corresponde a la obtenida con potencial LDA. Se observa cómo el potencial PBE sobrestima el valor de energía encontrado con WC, mientras que la parametrización LDA lo subestima. El potencial de Wu-Cohen muestra un valor que se aproxima al promedio de las otras dos parametrizaciones con las que se llevaron a cabo los cálculos.

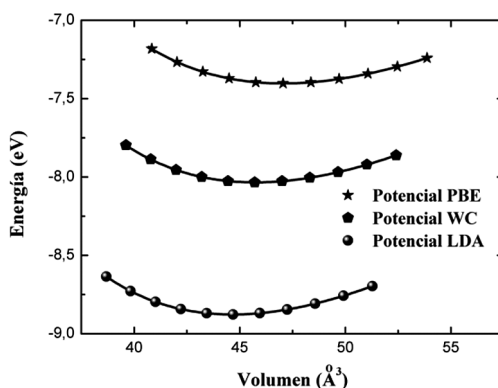


Figura 2. Energía versus volumen para la estructura más estable, ZnB, del InAs, estudiada con las parametrizaciones PBE, Wu-Cohen y LDA. Los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan.

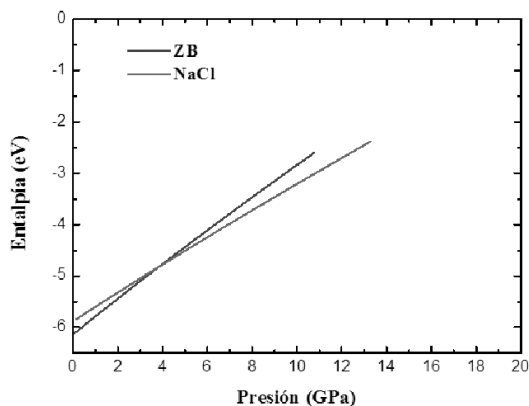


Figura 3. Entalpía en función de la presión para el InAs en la fase estructural estable ZnB y la fase cloruro de sodio potencial WC.

En la figura 1 se observa que la estructura más estable, Zinc blenda, tiene un volumen de equilibrio mayor que las otras cuatro estructuras analizadas, y su valor de energía mínima es más cercano al de la estructura Cloruro de Sodio (NaCl); puede presentarse una transición de fase entre ellas; la curva correspondiente a la fase más estable (Zinc-Blenda) se cruza con la curva de la estructura NaCl, de menor volumen de equilibrio, indicando transición de fase a alta presión de la estructura Zinc-Blenda a la NaCl. Para describir la transición de fase, calculamos la entalpía en función de la presión para cada estructura a $T=0$ °K. La figura 3, de entalpía vs presión, muestra que a una presión de 4 GPa se da una transición de fase entre la estructura Zinc blenda y NaCl, dado que a esta presión se cruzan las curvas de entalpía, correspondientes a estas dos estructuras. Se observa que antes de que se dé la transición; es decir, para valores de presión menores que 4GPa, la fase Zinc-Blenda tiene valores más bajos de entalpía, lo que indica la estabilidad relativa de dicha fase en este rango de presiones. Mientras que para valores de presión por encima de 4GPa, la fase NaCl tiene valores más bajos de entalpía, lo que indica su estabilidad en este rango de presiones.

Potencial WC				
CsCl			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'o
43. 308	3. 511	-5. 430	66. 871	5. 586
NaCl			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'o
45. 333	5. 660	-5. 878	71. 255	4. 900
NiAs			c/a= 1, 7173	
V (Å ³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'o
45. 924	3. 952	-5. 532	68. 917	4. 770
Wurt			c/a= 1. 6419	
V (Å ³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'o
56. 562	4. 300	-5. 862	55. 340	4. 745
ZB			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'o
56. 657	6. 096	-6. 133	55. 914	4. 729

Tabla 1. Propiedades estructurales del InAs con el potencial WC

Esta transición de fase estructural se ha observado a una presión de 7 GPa en trabajos previos (Nelmes et al; 1995). Los parámetros estructurales de las fases cristalinas, CsCl, NaCl, Wurtzita, NiAs y ZnB, se muestran en la Tabla 1. Por su bajo valor de módulo de volumen ($B_0=55.914$ GPa) respecto al del diamante, el InAs presenta bajo grado de dureza y resistencia a la tensión; por lo tanto, se recomienda en recubrimientos suaves que le permitan aplicaciones como lubricantes.

Las figuras 4 y 5 corresponden a la estructura de bandas y densidad de estados (DOS) obtenidas con el potencial de Wu-Cohen para la fase más estable (Zinc Blenda) del compuesto InAs

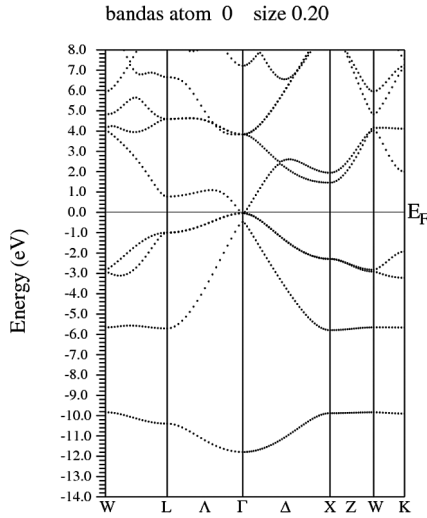


Figura 4. Estructura de bandas en el volumen de equilibrio del InAs en la fase ZnB con el potencial WC.

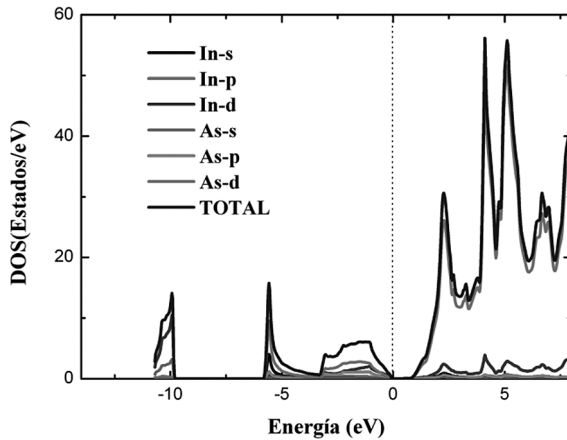


Figura 5. Densidad de estados en el volumen de equilibrio del InAs en la fase ZnB, con el potencial WC. Se muestra la contribución de los orbitales *s*, *p*, y *d* de los átomos As e In a la densidad de estados total.

La estructura de bandas del compuesto InAs, en la figura 4, muestra que el material es un semiconductor, debido a que ningún nivel de energía de la banda de valencia o de la banda de conducción cruza el nivel de fermi E_F . La banda de valencia se encuentra por debajo del nivel de fermi y la de conducción por encima de éste. Dado que el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción se encuentran en el mismo punto de alta simetría, el InAs es un material semiconductor, de brecha prohibida de energía directa, lo cual lo hace atractivo para posibles aplicaciones en la construcción de materiales emisores de luz y dispositivos electrónicos como sensores, filtros y transistores, entre otros.

Debido a que el fondo de la banda de conducción y el techo de la banda de valencia están muy cercanos, el ancho de la brecha prohibida es muy pequeño (-0.1 eV). Este valor subestima el valor experimental (Fang *et al.*, -0.415 eV) y corrobora la usual tendencia de la GGA de subestimar el valor experimental de la brecha prohibida de energía en semiconductores. La magnitud del gap de energía se verifica con la gráfica de la densidad de estados, figura 5, en la que no hay presencia de estados en el nivel de fermi (0 eV). Observamos que, tanto en la banda de valencia como en la banda de conducción, el orbital que hace el mayor aporte a la DOS total es el As-d, presentando en la banda de conducción su mayor pico, aproximadamente en 5 eV, lo que indica la presencia de estados localizados en una estrecha ventana de energía, donde se encuentra mayoritariamente el estado As-d y una presencia minoritaria de los demás estados. Los picos de energía, que indican estados bien localizados en una ventana de energía en la gráfica de la DOS, figura 5, se muestran como espaguetis prácticamente planos en la figura 4.

El segundo material, del cual mostraremos y analizaremos los resultados obtenidos, es el Arseniuro de Aluminio (AlAs); haremos mayor énfasis en las propiedades obtenidas con la parametrización de Wu-Cohen, dado que presentó mejor concordancia con los resultados teóricos y experimentales, reportados previamente por otros autores (Aouina *et al.*, 2005; Wyckoff *et al.*, 1986; Adachi *et al.*, 2005; Ahmed *et al.*, 2007).

La figura 6 permite comparar las energías de las diferentes fases cristalinas, consideradas para el análisis del compuesto binario Arseniuro de Aluminio (AlAs), obtenidas con el potencial Wu-Cohen. La fase estructural más estable hallada en los tres potenciales es la Zinc Blenda (ZB) debido a que presenta un mínimo de energía más bajo, respecto al de las otras fases analizadas. Esta estructura tiene mayor relevancia sobre las demás fases cristalinas consideradas, porque determina el carácter general del compuesto AlAs, ya que corresponde al estado de cristalización natural o estado base. Las energías y volúmenes fueron reportadas por fórmula unidad de InAs.

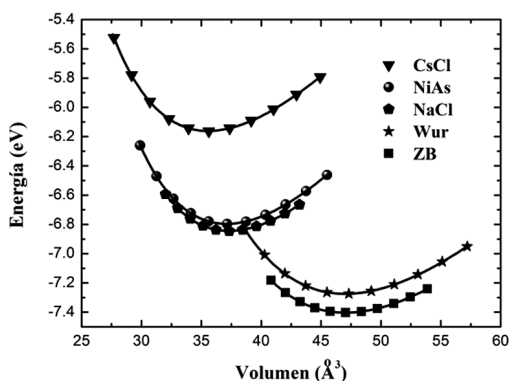


Figura 6. Energía versus volumen para las cinco estructuras de AlAs estudiadas con el potencial WC. Los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan. El cero de la energía se ha elegido como la suma de las energías de los átomos aislados.

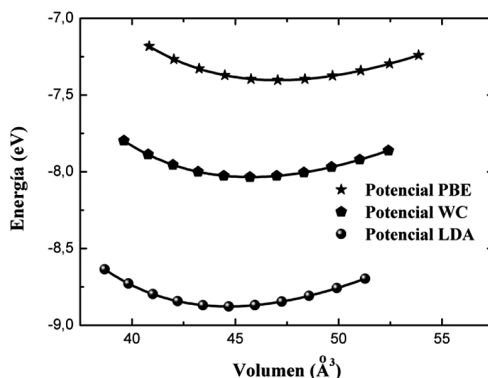


Figura 7. Energía versus volumen para la estructura más estable, ZnB, del AlAs, estudiada con las parametrizaciones PBE, Wu-Cohen y LDA. Los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan.

En la figura 7 observamos que la energía más baja para la estructura del estado base corresponde a la obtenida con potencial LDA. Se observa cómo el potencial PBE sobrestima el valor de energía encontrado con WC, mientras que la parametrización LDA lo subestima. El potencial de Wu-Cohen muestra un valor que se aproxima al promedio de las otras dos parametrizaciones con las que se llevaron a cabo los cálculos.

La estructura más estable, ZB, tiene un volumen pequeño en comparación con las otras estructuras del AlAs, excepto para la fase wurcita, pero esta última, como se aprecia en la tabla 6 y la figura 9, presenta volumen más grande que el de la ZB, y las

otras estructuras tienen un mínimo de energía muy alto. Por estas razones, es poco probable que se presente una transición de fase de la estructura ZB a cualquiera de las otras estructuras consideradas. El cambio de fase debe ser inducido mediante la aplicación de una presión externa muy grande. Los parámetros estructurales de las fases cristalinas, CsCl, NaCl, Wurtzita, NiAs y ZnB, se muestran en la tabla 2.

Potencial WC				
CsCl			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	E _o (eV)	B _o (GPa)	B' _o
34. 619	3. 259	-6. 932	79. 029	4. 387
NaCl			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	E _o (eV)	B _o (GPa)	B' _o
36. 326	5. 257	-7. 605	87. 224	4. 338
NiAs			c/a= 1, 593	
V (Å ³)	a (Å)	E _o (eV)	B _o (GPa)	B' _o
36. 144	3. 741	-7. 547	87. 486	4. 341
Wurt			c/a= 1. 643	
V (Å ³)	a (Å)	E _o (eV)	B _o (GPa)	B' _o
45. 701	4. 004	-7. 905	71. 092	4. 283
ZB			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	E _o (eV)	B _o (GPa)	B' _o
42. 733	5. 676	-8. 034	71. 688	4. 253

Tabla 2. Propiedades estructurales del AlAs con el potencial WC

Por su bajo valor de módulo de volumen ($B_0=71.688$ GPa) respecto al del diamante, el AlAs presenta bajo grado de dureza y resistencia a la tensión; por lo tanto, se recomienda en recubrimientos suaves que le permitan aplicaciones como lubricantes. El bajo valor de energía de su fase de cristalización lo hace químicamente estable.

Las figuras 8 y 9 corresponden a la estructura de bandas y densidad de estados (DOS) obtenidas con el potencial de Wu-Cohen para la fase más estable (Zinc Blenda) del compuesto AlAs.

La estructura de bandas del compuesto AlAs, en la figura 8, muestra que el material es un semiconductor, debido a que ningún nivel de energía de la banda de valencia o de la banda de conducción cruza el nivel de Fermi E_F . La banda de valencia se encuentra por debajo del nivel de Fermi y la de conducción por encima de éste. Dado que el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción no están en el mismo punto de alta simetría, el AlAs es un material semiconductor de brecha prohibida de energía indirecta. Presenta una brecha prohibida de energía de aproxi-

madamente 1.5 eV, lo que se verifica en la gráfica de la densidad de estados, figura 9, en la que no hay estados electrónicos en el nivel de fermi (0 eV). La figura 9 también revela que, tanto en la banda de valencia como en la banda de conducción, el orbital que hace el mayor aporte a la DOS total es el As-d, presentando su mayor pico en 5 eV, lo que indica la presencia de estados localizados en una estrecha ventana de energía, donde se encuentra mayoritariamente el estado As-d, y una presencia minoritaria de los demás estados en esta parte de la banda de conducción. Los picos de energía que indican estados bien localizados en una ventana de energía en la gráfica de la DOS, figura 9, se muestran como espaguetis prácticamente planos en la figura 8.

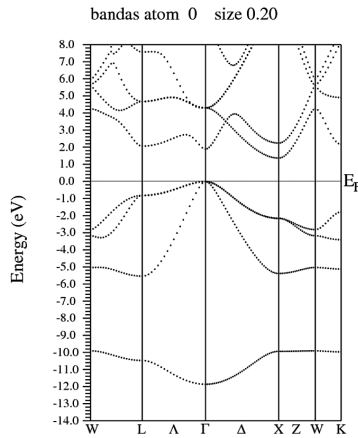


Figura 8. Estructura de bandas en el volumen de equilibrio del ALAs en la fase ZnB con el potencial WC.

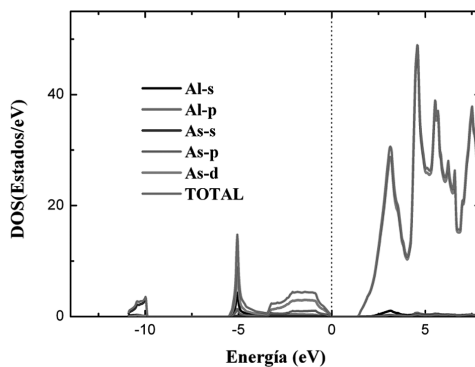


Figura 9. Densidad de estado en el volumen de equilibrio del ALAs en la fase ZnB, con el potencial WC. Se muestra la contribución de los orbitales *s*, *p*, y *d* del átomo As y los orbitales *s* y *p* del átomo Al a la densidad de estados total.

El tercer material, del que presentaremos y analizaremos los resultados, es el Arseniuro de Escandio (ScAs); haremos mayor énfasis en las propiedades obtenidas con la parametrización de Wu-Cohen, dado que presentó mejor concordancia con los resultados teóricos y experimentales, reportados previamente por otros autores (Maachou *et al*, 2007; Ugur *et al*, 2008).

Las figura 10 permite comparar las energías de las diferentes fases cristalinas, consideradas para el análisis del compuesto binario ScAs, y obtenidas con el potencial Wu-Cohen. La fase estructural más estable, hallada en los tres potenciales, es el Cloruro de Sodio (NaCl) debido a que presenta un mínimo de energía más bajo, respecto al de las otras fases analizadas. Esta estructura tiene mayor relevancia sobre las demás fases cristalinas consideradas, porque determina el carácter general del compuesto ScAs, ya que corresponde al estado de cristalización natural, o estado base. Las energías y volúmenes fueron reportadas por fórmula unidad de ScAs.

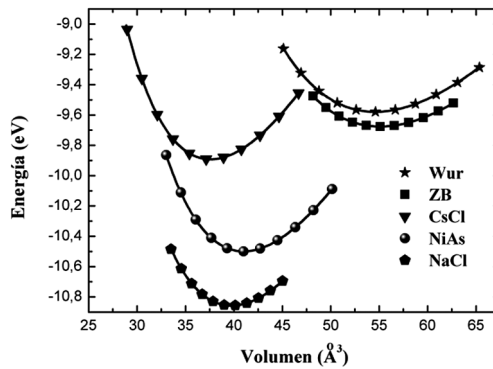


Figura 10. Energía versus volumen para las cinco estructuras de ScAs estudiadas con el potencial WC. Los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan.

El cero de la energía se ha elegido como la suma de las energías de los átomos aislados.

En la figura 11 observamos que la energía más baja para la estructura del estado base corresponde a la obtenida con potencial LDA. Se observa cómo el potencial PBE sobreestima el valor de energía encontrado con WC, mientras que la parametrización LDA lo subestima. El potencial de Wu-Cohen muestra un valor que se aproxima al promedio de las otras dos parametrizaciones con las que se llevaron a cabo los cálculos.

En la figura 10 se observa que la estructura más estable, NaCl, presenta un volumen pequeño en comparación con las otras estructuras del ScAs, excepto para la fase CsCl, pero esta última presenta un mínimo de energía muy alto respecto al del NaCl.

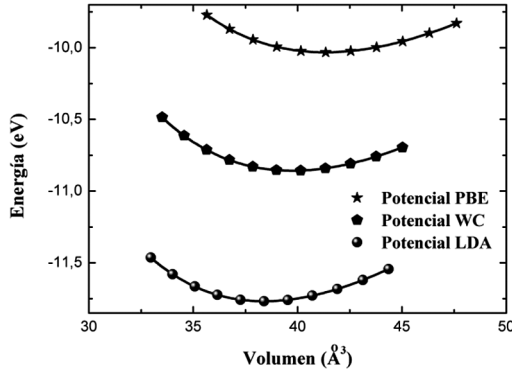


Figura 11. Energía versus volumen para la estructura más estable, ZnB, del ScAs estudiada con las parametrizaciones PBE, Wu-Cohen y LDA. Los símbolos corresponden a los datos calculados y la línea sólida al ajuste de Murnaghan.

Por las anteriores razones, es poco probable que se presente una transición de fase de la estructura NaCl a cualquier otra estructura aquí considerada. Para lograr la transición, se necesitaría aplicar al compuesto una presión muy alta.

Los parámetros estructurales de las fases cristalinas, CsCl, NaCl, Wurtzita, NiAs y ZnB, se muestran en la tabla 3. Por su alto valor de módulo de volumen ($B_0=91.239$ GPa) respecto al del diamante, el ScAs resulta útil en aplicaciones de relativa dureza, como recubrimientos y películas protectoras de otros materiales utilizados en pruebas de esfuerzo, tensión física, exposiciones a extremas condiciones ambientales u otras tareas similares. El bajo valor de energía de su fase de cristalización lo hace químicamente estable.

Potencial WC				
CsCl			c/a= ---	
V (Å³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'0
37.589	3.349	-9.892	89.643	3.889
NaCl			c/a= ---	
V (Å³)	a (Å)	Eo (eV)	Bo (GPa)	B'0
39.753	5.417	-10.857	91.239	3.932
NiAs			c/a= 1.7188	

Potencial WC				
V (Å ³)	a (Å)	E ₀ (eV)	B ₀ (GPa)	B'₀
41. 010	3. 805	-10. 499	89. 720	4. 003
Wurt			c/a= 1. 5957	
V (Å ³)	a (Å)	E ₀ (eV)	B ₀ (GPa)	B'₀
54. 594	4. 290	-9. 578	59. 022	3. 879
ZB			c/a= ---	
V (Å ³)	a (Å)	E ₀ (eV)	B ₀ (GPa)	B'₀
55. 097	6. 040	-9. 676	58. 947	3. 974

Tabla 3. Propiedades estructurales del ScAs con el potencial WC.

Las figuras 12 y 13 corresponden a la estructura de bandas y densidad de estados (DOS) respectivamente, de la fase cristalina más estable, la de Cloruro de Sodio, del compuesto ScAs con el potencial de Wu-Cohen, cuya parametrización arroja mayor concordancia estructural, respecto a estudios previos realizados con el mismo compuesto (Maachou *et al.*, 2007).

La estructura de bandas del compuesto ScAs, en la figura 12, muestra que el material es un metal, ya que los niveles de energía de la banda de conducción y la banda de valencia cruzan el nivel de Fermi E_F , traslapándose entre ellos.

Por su comportamiento metálico, el ScAs es útil para la construcción de capas conductoras, ubicadas entre dos materiales con no muy buenas propiedades de conducción, pero sí de emisión de luz, absorción de energía lumínica o de otro tipo. En el eje vertical se muestra la energía en eV y en el eje horizontal se registran los vectores k , a lo largo de algunas direcciones de alta simetría en la primera zona de Brillouin. El nivel de Fermi se ha tomado como el cero de la energía. Como se observa en la figura 15, dada la condición de metal del compuesto, no existe entre las bandas de conducción y de valencia una brecha de energía identificable, lo que se comprueba al observar la densidad de estados del material, figura 13, en la cual se observa claramente la presencia de estados electrónicos en el nivel de Fermi (0 eV). Sobre la figura 13 podemos agregar que As-d es el que aporta en mayor medida a la DOS total, presentando su pico más grande aproximadamente en 3 eV, el cual da cuenta de una excelente localización de los estados en una estrecha ventana de energía, donde se encuentra principalmente el estado As-d, en la banda de conducción, y en cuya vecindad se aprecia una menor contribución de Sc-d y Sc-s. Los picos de energía que indican estados bien localizados en una ventana de energía en la gráfica de la DOS, figura 13, se muestran como espaguetis prácticamente planos en la figura 12.

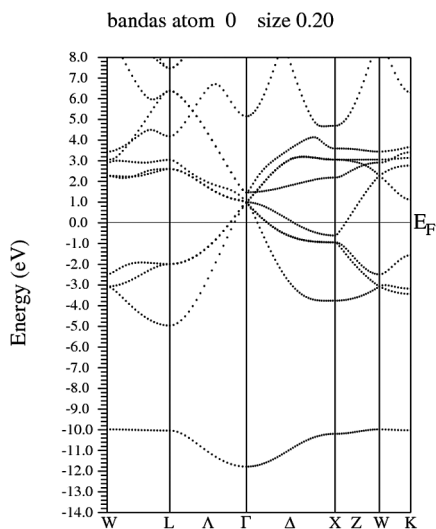


Figura 12. Estructura de bandas en el volumen de equilibrio del ScAs en la fase NaCl con el potencial WC

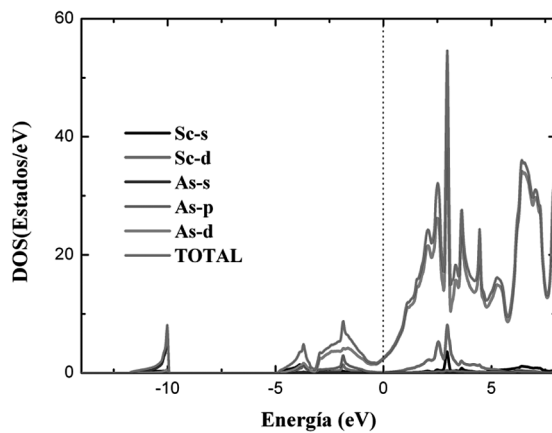


Figura 13. Densidad de estados en el volumen de equilibrio del ScAs en la fase NaCl, con el potencial WC. Se muestra la contribución de los orbitales *s*, *p*, y *d* del átomo As y los orbitales *s* y *d* del átomo Sc a la densidad de estados total.

4. CONCLUSIONES

Se han presentado las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos InAs, AlAs y ScAs en cinco estructuras: NaCl, zinc blenda, wurtzita, CsCl y NiAs. El estudio estructural predice que la estructura de cristalización más estable para los compuestos InAs y AlAs es la ZB, con posibilidad de que se presente una transición a la fase NaCl en el InAs, y sin posibilidad de transición de fase a otra estructura en el AlAs. Para el compuesto ScAs, tampoco se encontró posibilidad de transición de su fase más estable NaCl, a otra de las estructuras estudiadas. Para los parámetros calculados, se encontró buena concordancia con datos experimentales y teóricos, previamente desarrollados por otros autores (R.W.G. Wyckoff *et al.*, 1986; O.Madelung *et al.*, 1982; Aouina *et al.*, 2005; Adachi *et al.*, 2005; Ahmed *et al.*, 2007; Maachouet *al.*, 2007; Ugur *et al.*, 2008).

Este trabajo es relevante para estudios posteriores, ya que constituye un excelente cuadro comparativo entre las parametrizaciones PBE, LDA y WC.


AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a la DIP-UNINORTE por el apoyo financiero al desarrollo de esta investigación, en el marco del proyecto de joven investigador. Los cálculos se realizaron en el cluster Hiper-lab de Ciencias Básicas en la Universidad del Norte-Barranquilla

BIBLIOGRAFÍA

- Adachi, S. (2005). *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. England: John Wiley & Sons.
- Ahmed, R., Javad, S., Hashemifar, Akbarzadeh, H., Ahmed, M., y Fazal-e-Aleem (2007). Ab initio study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds. *Computational Materials Science*, 39, 580–586.
- Aja Abelan, B. (2006). *Amplificadores de Banda Ancha y Bajo Ruido Basados en Tecnología de GaAs para Aplicaciones de Radiometría*. Tesis Doctoral no publicada, Universidad de Cantabria, Santander, España.
- Aouina, N.Y., Mezrag, F., Boucenna, M., El-Farra, M., Bouarissa, N. (2005). High pressure electronic properties and elastic stability criteria of AlAs. *Materials Science and Engineering B*, 123, 87–93.
- Bautista-Hernandez, A., Perez-Arrieta, L., Pal, U., y Rivas-Silva, J.F. (2003). Estudio estructural de los semiconductores AlP, GaAs y AlAs con estructura wurtzita. *Revista Mexicana de física*, 49, 9-14.

- Barrera, M., Plá, J., y Rubinelli, F. (2007). simulación numérica de celdas solares de GaAs. *Asades*, 11, 04.93-04.99.
- Blaħa, P., Schwarz, K., Sorantin, P., y Trickey, S. B. (1990). *Comput. Phys. Commun*, 59, 399 - 415
- Bodnar, I. V., Lukomskii, A. I., y Smirnova G. F. (1976). Absorption edge of InP_xAs_{1-x} mixed crystals. *Phys. Status Solidi A*, 37, 173-176.
- Fang, Z. M., Ma, K. Y., Jaw, D. H., Cohen, R. M., Stringfellow, G. B. (1990). Photoluminescence of InSb, InAs and InAsSb grown by organometallic vapor phase epitaxy. *J. Appl. Phys*, 67, 7034-7039
- Foresman, J.B., y Frish, A.E. (1995). Exploring Chemistry with Electronic Methods Gaussian Inc. *Pittsburgh PA*, 2, 90-123.
- Hohenberg, P., y Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Phys Rev*, 136(3B), 864-871.
- Kohn, W., y Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev*, 140, A1133–A1138.
- Landolt-Bornstein, O. (1982). *Semiconductors, Physics of Group IV Elements and III-V Compounds*. Berlin: New Series, Group III, Springer-Verlag.
- Maachou, A., Amrani, B., y Driz, M. (2007). Structural and electronic properties of III-V scandium compounds. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 388, 384-389.
- Matossi, F., y Stern, F. (1958). Temperature Dependence of Optical Absorption in p-Type Indium Arsenide. *Phys. Rev*. 111, 472-475.
- Murnaghan, F. D. (1944). The compressibility of media under extreme pressures. *Proc. Natl. Acad. Sci*, 30, 244-247.
- Nelmes, R.J., McMahon, M.I., Wright, N.G., Allan, D.R., Liu, H., y Loveday, J.S. (1995). Structural studies of III–V and group IV semiconductors at high pressure. *J. Phys. Chem. Solids*, 56, 539-543.
- O. Madelung (1996). *Semiconductors - Basic data 2nd*. Berlin: Springer.
- Perdew, J., Burke, K., y Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett*, 77, 3865-3868.
- Pidgeon, C.R., Mitchell, D. L., y Brown, R. N. (1967). Interband Magneto absorption in InAs and InSb. *Phys. Rev*, 154, 737-742.
- Ugur, S., y Soyalp, F. (2008). First principles linear response calculations of phonons for ScP and ScAs. *Solid State Communications*, 147, 198–200.

- Vurgaftman, I., Meyer, J.R., Ram-Mohan, L.R. (2001). Ab Initio study of structural and electronical properties of III-arsenide binary compounds. *J. ApplPhys*, 89, 5815.
- Winkler, B., y Milman, V. (1999). Ab Initio modeling in crystallography. *Elsevier*, 1, 273-279.
- Wu, Z., Cohen, R. E. (2006). More accurate generalized gradient approximation for solids. *Phys. Rev. B*, 73, 235116-1 235116-7.
- Wyckoff, R.W.G. (1986). *Crystal Structures*. Journal of Physics and chemistry of solids. Malabar: Krieger. 

Referencia	Fecha de recepción	Fecha de aprobación
Simon Nicolas G. y López Pérez William Cálculos de primeros principios de las propiedades estructurales y electrónicas de los compuestos arsénicos XAs (X=In, Al, Sc) Revista Tumbaga (2011), 6, 173-189	Día/mes/año 09/11/2010	Día/mes/año 14/07/2011