

Índice general

Resumen	I
Abstract	III
1. Introducción y antecedentes de la investigación	1
1.1. Antecedentes de la investigación	4
1.2. Obtención experimental de muestras de $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ y características estructurales	4
1.3. Medición de propiedades electrónicas	4
1.3.1. Cálculos electrónicos <i>ab-initio</i> para los defectos locales de Sn en Ge	7
1.3.2. Modelo estadístico para la formación de la aleación $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$. . .	9
1.4. Evidencia experimental de la formación de defectos no sustitucionales β -Sn, en la aleación $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$	11
2. Estructura electrónica de $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$: esquema general de cálculo, y resultados para la aleación sustitucional	15
2.1. Esquema general de cálculo de estructura electrónica empleado para $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ con α -Sn y β -Sn	16
2.2. La aleación sustitucional $\text{Ge}+\alpha$ -Sn	18
2.2.1. Estructura de bandas TB+VCA: naturaleza del gap en función de la concentración de Sn (α -Sn)	19
2.2.2. Cálculo de densidad de estados (DOS) de la aleación $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ sustitucional	24
2.2.3. Resultados: DOS total y densidades de estados parciales de la aleación sustitucional	26
3. β-Sn: Problema sustitucional equivalente de 2-sitios	35
3.1. Configuraciones β -no sustitucional (real) y β -equivalente (sustitucional) . .	35

3.2. Planteamiento de la equivalencia con funciones de Green	36
3.2.1. Soluciones posibles: $t = 0$ y $t = t'$	41
4. Estructura electrónica de la aleación $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$: con defectos β-Sn.	45
4.1. Extensión de la VCA a la aleación con β -Sn	45
4.1.1. Resultados: Efectos de β -Sn sobre la estructura de bandas	50
4.1.2. Resultados: Efectos de β -Sn sobre la densidad de estados	55
5. Conclusiones	67
A. Propiedades de la estructura de diamante	71
B. Sistemas desordenados y técnicas de tratamiento: Aproximación de cristal virtual	75
B.1. Introducción a sistemas desordenados	75
B.2. Tipos de desorden	76
B.3. Aproximaciones no-autoconsistentes para $\langle G \rangle$	80
B.3.1. Modelo de banda rígida	82
B.3.2. Aproximación de cristal virtual	83
C. Modelo estadístico para la formación de la aleación $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$	85
D. Aproximación Tight-binding para semiconductores del grupo IV.	91
D.1. Orbitales moleculares y parámetros de solapamiento	91
D.2. Estructura de bandas de elementos del grupo IV por el método tight-binding	92
D.3. Acoplamiento Espín-Órbita en semiconductores del grupo IV	94
E. Método de Chadi-Cohen: suma sobre puntos especiales de la 1^{era} zona de Brillouin	101
E.1. Puntos especiales de la Zona de Brillouin	101
E.1.1. Consideraciones generales de la integración sobre puntos especiales en la zona de Brillouin [36]	102
E.1.2. Uso de ondas planas para la integración en la zona de Brillouin	104
E.1.3. Método de Chadi-Cohen: implementación para la red de diamante	106
Agradecimientos	111