

Índice General

Agradecimientos	i
Resumen	iii
Abstract	vii
Prólogo	xi
1 Introducción general	1
1.1 Aleaciones semiconductoras del grupo IV	1
1.2 Superconductores basados en hierro	6
1.3 Superconductores basados en BiS ₂	15
Parte I: Aleaciones semiconductoras del grupo IV	21
2 Estructura electrónica de aleaciones binarias Ge_{1-x}Sn_x	23
2.1 Introducción	23
2.2 Incorporación de defectos no-sustitucionales complejos β -Sn en el cálculo de estructura electrónica de Ge _{1-x} Sn _x	24
2.3 Transición de gap indirecto a gap directo en Ge _{1-x} Sn _x	32
2.4 Efecto de β -Sn en la estructura electrónica	36
2.4.1 Estructura electrónica para la componente Ge+ α -Sn de la aleación binaria efectiva	36
2.4.2 TB+VCA extendida incluyendo defectos α -Sn y β -Sn	39
2.5 Resultados principales	44
3 Estructura electrónica de aleaciones ternarias Ge_{1-x-y}Si_xSn_y	47
3.1 Introducción	47
3.2 Método TB+VCA para aleaciones ternarias Ge _{1-x-y} Si _x Sn _y	47
3.3 Resultados y discusión	49
3.4 Resultados principales	58

Parte II: Nuevos Superconductores: ferropnictidos y calcogenuros de hierro, y compuestos basados en BiS₂	59
4 Descripción de los nuevos superconductores: modelo microscópico con 2 bandas efectivas correlacionadas	61
4.1 Introducción	61
4.2 Modelo microscópico correlacionado	61
4.3 Tratamiento perturbativo del modelo microscópico	63
5 Dependencia con dopaje y temperatura de las propiedades espectrales de los superconductores ferropnictidos	67
5.1 Introducción	67
5.2 Antecedentes	68
5.3 Modelo de Raghu <i>et al.</i> para los orbitales efectivos de superconductores ferropnictidos	70
5.4 Resultados y discusión	72
5.4.1 Efecto de las interacciones de Coulomb intra- e inter-orbitales sobre la densidad de estados total $A(\omega)$	73
5.4.2 Efectos del dopaje sobre la estructura electrónica	77
5.4.3 Efecto de la temperatura sobre la estructura electrónica	83
5.4.4 Análisis de la autoenergía $\Sigma(\vec{k}, \omega)$ y el peso de cuasipartícula en el nivel de Fermi	89
5.5 Resultados principales	99
6 Propiedades electrónicas del estado normal de superconductores LaO_{1-x}F_xBiS₂	101
6.1 Introducción	101
6.2 Modelo de Usui <i>et al.</i> para los orbitales efectivos no-correlacionados en superconductores basados en BiS ₂	102
6.3 Resultados y discusión	104
6.3.1 Efecto de las interacciones coulombianas intra- e inter-orbitales sobre la estructura electrónica y la topología de la superficie de Fermi.	105
6.3.2 Dependencia con momento \vec{k} de la densidad espectral $A(\vec{k}, \omega)$	110
6.3.3 Efecto del dopaje con electrones sobre la DOS	112
6.3.4 Efecto de la temperatura sobre la DOS y la densidad espectral	113
6.4 Resultados principales	119

7	Magnetotransporte en el estado normal de superconductores β-FeSe	121
7.1	Introducción	121
7.2	Cálculo de las propiedades de magnetotransporte de los compuestos FeSe	122
7.2.1	Modelo microscópico mínimo con dos orbitales para FeSe	122
7.2.2	Cálculo del tensor de conductividad eléctrica y el coeficiente de Hall . . .	124
7.3	Resultados y discusión	126
7.4	Resultados principales	132
8	Conclusiones generales	135
A	Aproximación de enlace fuerte para semiconductores del grupo IV.	141
B	Método de Chadi-Cohen para sumas sobre sobre la primera zona de Brillouin	149
C	Desacoplamiento de las ecuaciones de movimiento para las funciones de Green	157
D	Cálculo de la conductividad eléctrica	169
	Anexos: Difusión de resultados de la tesis	193