



VNiVERSIDAD D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

Grado en Física

Trabajo de Fin de Grado

Método k.p aplicado al Arseniuro de Galio (GaAs)

Autor: Alberto Villas Pazos

Tutor: Pablo González Espeso

Método k.p aplicado al Arseniuro de Galio (GaAs)

Autor: Alberto Villas Pazos

Tutor: Pablo González Espeso

D. Pablo González Espeso, Profesor titular de la Universidad de Salamanca autoriza la presentación de este Trabajo de Fin de Grado titulado "Método k.p aplicado al Arseniuro de Galio (GaAs)" realizado bajo su dirección por el estudiante del Grado de Física D. Alberto Villas Pazos.

Fdo. PABLO GONZÁLEZ ESPESO

Resumen

Este trabajo trata de introducir la teoría del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para el cálculo de estructura de bandas de semiconductores, en concreto al Arseniuro de Galio. Los tres métodos más utilizados para el cálculo de bandas son "tight-binding", pseudopotencial y el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. En el caso del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ se escoge una base formada por funciones Bloch mientras que en los otros dos se toman estados atómicos o ondas planas respectivamente. Cada uno de los tres métodos tiene sus ventajas y desventajas.

No se pretende realizar un estudio ni una exposición exhaustiva del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, si no más bien familiarizarse con la metodología de la teoría y mostrar como se pueden obtener buenos resultados aplicando al caso concreto del Arseniuro de Galio.

Este trabajo comienza deduciendo la expresión del hamiltoniano que da nombre al método, particularizando la ecuación de Schrödinger para funciones tipo Bloch y seguidamente se hace lo mismo con la ecuación de Dirac para obtener una expresión equivalente que tiene en cuenta la interacción espín-órbita.

Fijada una base de estados Bloch se estudian los términos matriciales del hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ en dicha base haciendo uso de argumentos de simetría y teoría de representaciones irreducibles. Estar familiarizado con la teoría de representaciones irreducibles sin duda ayuda para seguir las deducciones de este trabajo pero no es un requisito necesario ya que se puede entender en función de argumentos de simetría.

Seguidamente se aplica la teoría de perturbaciones de Löwdin, que puede encontrarse en el apéndice A, que es necesaria para obtener resultados correctos. La necesidad de la teoría de Löwdin radica en que la base considerada es una base finita y es necesario tener en cuenta la interacción de los estados cercanos en energía mediante perturbaciones.

Posteriormente se estudia la interacción espín-órbita calculando la expresión matricial de la interacción en la base de funciones propias del momento angular total $|J, J_z\rangle$ así como la matriz del cambio de base de la base original a dicha base.

Finalmente se presentan los resultados obtenidos mediante cálculos por ordenador para cinco modelos distintos: un primer modelo en el que se consideran la primera banda de conducción y tres bandas de valencia, un segundo modelo en el que se consideran las cuatro bandas anteriores y tres bandas de conducción adicionales, un tercer modelo en el que se tiene en cuenta la interacción espín-órbita para el primer modelo, un cuarto modelo que considera un término adicional proveniente de la interacción espín-órbita para el tercer modelo y un quinto modelo que tiene en cuenta la interacción espín-órbita para el segundo modelo. Los resultados obtenidos incluyen bandas de energía a lo largo de los ejes Δ , Λ y Σ , representación tridimensional de las bandas y líneas isoenergéticas en un plano, valores de masas efectivas para cada banda en el punto Γ y dependencia del tensor de masa efectiva con el vector de onda a lo largo de los ejes Δ , Λ y Σ .

Summary

The aim of this work is to be an introduction to the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ theory for calculation of band structure of semiconductors, specifically of Gallium Arsenide. The three main conventional methods for calculation of band structure are tight-binding, pseudopotential and $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method. Each method chooses a different type of functions for the basis: atomic-like, plane waves, and Bloch states, respectively. Each of the methods have their advantages and disadvantages.

This work is not an exhaustive study of the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method but rather a way to get familiar with the methodology of the theory and show how good results can be obtained in the particular case of Gallium Arsenide.

In Chapter 2 we develop the theoretical framework of the k.p theory.

In Section 1 of chapter 2 the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ expression of the hamiltonian is deduced by particularizing the Schrödinger's equation for Bloch functions and the same is done with Dirac's equation to obtain an analogous expression that takes into account the spin-orbit interaction.

In Section 2, a basis of Bloch states is fixed and then we study which terms of $\vec{k} \cdot \vec{p}$ operator are equal or not equal to zero in that base by making use of symmetry arguments and irreducible representation theory. A knowledge of irreducible representations theory is rather useful but not strictly necessary for the understanding of this work.

In Section 3 we make use of Löwdin perturbation theory, that can be found in Appendix A, to perturb the basis in order to obtain good results. The Löwdin perturbation must be included due to the fact that the chosen basis is rather small and one has to take into account the energy-near states by including the perturbation that those states induce in the basis.

In section 4 we study the spin-orbit interaction and deduce the matrix elements of the interaction in the basis of eigenfunctions of total angular momentum $|J, J_z\rangle$ as well as the change of basis matrix that connects this basis with the original basis.

In section 5 we present the final form of the hamiltonian and the parameters use in the calculations.

In section 6 we discuss the commutation relation between J_z and $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Finally we present the results obtained via computer calculations for five different models: in the first model, the first conduction band and three valence bands are considered, in the second model, the four previous bands and three additional conduction bands are considered, in the third model, we consider the first model but taking into account the spin-orbit interaction, in the fourth model, we consider the third model but taking into account an additional term which follows from the spin-orbit interaction and in the fifth model we consider the second model but taking into account the spin-orbit interaction.

Palabras clave

Método k.p, bandas de energía, semiconductor, masa efectiva, electrón, hueco, banda de valencia, banda de conducción, arseniuro de galio.

Keywords

k.p method, energy bands, semiconductor, effective mass, electron, hole, valence band, conduction band, Gallium Arsenide.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Referencia histórica	1
1.1.1. Modelo de una banda	2
1.1.2. Dresselhaus–Kip–Kittel	2
1.1.3. Modelo de seis bandas	2
1.1.4. Modelo de cuatro bandas bandas a primer orden	2
1.1.5. Modelo de cuatro bandas bandas a segundo orden	3
1.1.6. Modelo de ocho bandas a primer orden	3
1.1.7. Modelo de ocho bandas a segundo orden	3
1.1.8. Otros Modelos	3
2. Objetivos	4
3. Desarrollo teórico	5
3.1. Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	5
3.1.1. Obtención del hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$	5
3.1.2. Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ con interacción espín-órbita	7
3.2. Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ en base de estados propios en el punto Γ	8
3.2.1. Funciones de celda y simetrías	8
3.2.2. Aplicación a materiales zinc-blenda	9
3.3. Teoría de perturbaciones de Löwdin	20
3.3.1. Expresión matricial del hamiltoniano perturbado	22
3.3.2. Calculo de masas efectivas mediante el método de perturbaciones de Löwdin	24
3.4. Término $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$ y de interacción spin-órbita en base de estados propios en el punto Γ	26
3.4.1. Términos nulos y no nulos del término $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$	26

3.4.2.	Forma matricial del término τ^{op}	30
3.4.3.	Término de espín-órbita	30
3.5.	Parámetros y expresiones de los hamiltonianos	35
3.5.1.	Parámetros	35
3.5.2.	Expresiones de los hamiltonianos	36
3.6.	Estados propios del hamiltoniano y J_z	37
4.	Resultados	38
4.1.	Bandas de energía	38
4.2.	Superficies isoenergéticas	45
4.3.	Masas efectivas	66
4.3.1.	Cálculo analítico	66
4.3.2.	Cálculos numéricos en el punto Γ	66
4.3.3.	Estudio de la dependencia de la masa con \vec{k}	68
5.	Conclusiones	131
5.1.	Conclusions	133
	Appendices	136
	Apéndice A. Teoría de perturbaciones de Löwdin	137
A.1.	Principio variacional	137
A.2.	Fórmula de la perturbación	138
	Apéndice B. Código fuente de los programas	140
B.1.	Cálculo de bandas de energía	140
B.1.1.	Programa principal	140
B.1.2.	Subrutina de construcción del hamiltoniano	144
B.1.3.	Subrutina de construcción del hamiltoniano con espín-órbita	146
B.1.4.	Subrutina EIGCH de diagonalización de matrices	150
B.2.	Superficies isoenergéticas	173
B.2.1.	Programa principal	173
B.3.	Masas efectivas en el punto Γ	176
B.3.1.	Programa principal	176
B.3.2.	Subrutina DERIVPAP	179
B.3.3.	Función DERIVATED	184
B.4.	Masas efectivas a lo largo de los ejes	187

B.4.1. Programa principal 187

Capítulo 1

Introducción

El método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ es un método para calcular la estructura de bandas de semiconductores que tiene la ventaja de requerir un número pequeño de parámetros de entrada, como por ejemplo, los "gaps" de energía. Estos parámetros, pueden determinarse experimentalmente mediante técnicas ópticas. El método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ es un método perturbativo que trabaja con una base de estados Bloch para la cual se supone resuelto el hamiltoniano del sistema para el punto Γ en el cual la perturbación es nula. Tras calcular la forma de la perturbación en la base se construye el hamiltoniano con el término $\vec{k} \cdot \vec{p}$ y se procede a su diagonalización para obtener las bandas de energía. Una ventaja de este método es que para ciertos puntos con simetría, la diagonalización del hamiltoniano es muy sencilla y pueden obtenerse expresiones analíticas. Para puntos de menor simetría se diagonaliza mediante ordenadores lo cual es una tarea rápida y sencilla para la tecnología de hoy en día.

1.1. Referencia histórica

A lo largo del siglo XX, distintos autores han considerado distintos modelos del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ que se diferencian en el tipo de materiales a los que se aplica, en el número de bandas que se toma en la base o el orden de perturbación que considerado.

1.1.1. Modelo de una banda

En este modelo la base considerada únicamente tiene un estado, correspondiente a la primera banda de conducción. Este estado es de tipo s y puesto que se comporta como una función radial, el elemento de matriz del término $\vec{k} \cdot \vec{p}$ es nulo. Para obtener resultados satisfactorios es necesario introducir via teoría de perturbaciones de Löwdin la influencia de los estados próximos en energía. Es un modelo muy simple que permite obtener resultados analíticos sencillos y reproduce bastante bien los resultados experimentales. La desventaja que tiene es que únicamente proporciona resultados para la banda de conducción.

1.1.2. Dresselhaus–Kip–Kittel

Este modelo considera una base formada por tres estados, correspondientes a la banda de valencia de materiales tipo diamante. Considera perturbaciones hasta segundo orden proporciona buenos resultados.

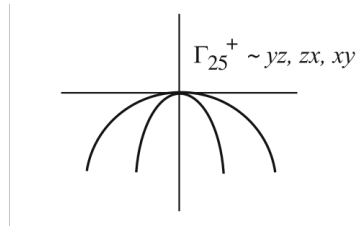


Figura 1.1: Modelo de tres bandas para semiconductores tipo diamante.

1.1.3. Modelo de seis bandas

Este modelo es igual que el modelo anterior pero teniendo en cuenta la interacción espín-órbita. Al considerar el espín, la base se duplica teniéndose estados con proyección de espín positiva y estados con proyección de espín negativa.

1.1.4. Modelo de cuatro bandas a primer orden

Este modelo toma una base de cuatro estados. Estos estados pertenecen tres a la banda de valencia y otro a la banda de conducción. Dado que es un modelo a primer orden no considera la perturbación Löwdin de los estados cercanos en energía. Predice correctamente las degeneraciones de las bandas de valencia pero los resultados para la banda de conducción no se ajustan bien a los datos

experimentales. Tiene la ventaja de que pueden obtenerse expresiones analíticas sencillas.

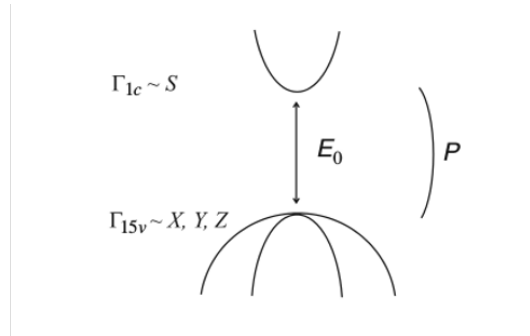


Figura 1.2: Modelo de cuatro bandas para semiconductores tipo zinc-blenda.

1.1.5. Modelo de cuatro bandas a segundo orden

Es igual que el modelo anterior pero considerando la interacción de los estados cercanos en energía mediante teoría de perturbaciones de Löwdin. Los resultados que proporciona son mejores que el modelo a primer orden pero tiene la desventaja que las expresiones analíticas son más complicadas.

1.1.6. Modelo de ocho bandas a primer orden

Es la inclusión de la interacción espín-órbita en el modelo de cuatro bandas a primer orden.

1.1.7. Modelo de ocho bandas a segundo orden

Es la inclusión de la interacción espín-órbita en el modelo de cuatro bandas a segundo orden.

1.1.8. Otros Modelos

En 2001 Cardona y Pollak propusieron un modelo de 20 bandas para el GaAs y el Si. Lo destacable de este modelo es que proporciona buenos resultados a lo largo de toda la primera zona de Brillouin. El mismo grupo ha extendido este modelo a modelos de 24 y 30 bandas.

Capítulo 2

Objetivos

El objetivo de este trabajo es introducir la teoría del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para el cálculo de estructura de bandas de semiconductores, en concreto al Arseniuro de Galio y la obtención de resultados de bandas de energía, superficies isoenergéticas masas efectivas y su dependencia con \vec{k} . También se pretende estudiar la validez de distintos modelos y las posibles mejoras que se pueden obtener al añadir más características a estos modelos.

Para ello, en este trabajo se estudiará el modelo de cuatro bandas consistente en la banda de conducción y tres bandas de valencia, el modelo de ocho bandas, que considera la interacción espín-órbita en el modelo anterior, el modelo de siete bandas, que considera las cuatro bandas anteriores y tres bandas de conducción adicionales y el modelo de catorce bandas, que considera la interacción espín-órbita en el modelo de siete bandas.

Capítulo 3

Desarrollo teórico

3.1. Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

3.1.1. Obtención del hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$

La red cristalina del semiconductor tiene propiedades de simetría que dan lugar a transformaciones lineales como translaciones, rotaciones y reflexiones por las cuales el sistema es invariante. Esto implica que los observables del sistema no cambian al aplicar estas operaciones. Al grupo de simetrías del cristal lo denoto como $G_0 = \{M_i\}$

En el espacio de funciones las transformaciones de simetría actúan de tal manera que la función transformada en punto transformado es igual a la función sin transformar en punto sin transformar.

$$f^{M_i}(\vec{r}) = f(M_i^{-1}\vec{r}) \quad (3.1)$$

En mecánica cuántica los observables vienen representados por operadores hermíticos. Siendo O uno de esos observables, al ser invariante por las transformaciones de simetría, se tiene

$$O^{M_i} = M_i O M_i^{-1} = O \Rightarrow [O, M_i] = 0 \quad (3.2)$$

En particular, el hamiltoniano del sistema será invariante por traslaciones de vectores de red. Siendo $T_{\vec{R}}$ el operador traslación por vector de red se tiene

$$[H, T_{\vec{R}}] = 0 \quad (3.3)$$

Y por lo tanto se puede encontrar una base de autoestados comunes de H y $T_{\vec{R}}$ que son las funciones Bloch

$$\psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad \text{con} \quad u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.4)$$

Siendo \vec{R} vector de red.

Aplicando la ecuación de Schrödinger a estas funciones se tiene

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}} \quad (3.5)$$

Por otro lado

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \psi_{n\vec{k}} = ik_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{\partial}{\partial x_i} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[-k_i^2 + 2ik_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.7)$$

Por lo tanto la ecuación 3.5 puede reescribirse en la forma

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}} \quad (3.8)$$

Para $\vec{k} = (0, 0, 0)$, punto Γ , la ecuación 3.8 queda

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{n0} = H_0 u_{n0} = E_{n0} u_{n0} \quad (3.9)$$

Para valores de \vec{k} pequeños el hamiltoniano se puede expresar como el hamiltoniano H_0 más un término perturbativo, H' , quedando la ecuación 3.8 en la forma

$$Hu_{n\vec{k}} = (H_0 + H')u_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k})u_{n\vec{k}} \quad (3.10)$$

Siendo $H' = (\hbar/m) \vec{k} \cdot \vec{p} + (\hbar^2 k^2) / (2m)$

3.1.2. Hamiltoniano $\vec{k} \cdot \vec{p}$ con interacción espín-órbita

Introduciendo la interacción espín-órbita en el hamiltoniano de un electrón en el cristal se tiene

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \left(\vec{\nabla} V(r) \times \vec{p} \right) \quad (3.11)$$

Veamos cómo actúa el último término de la ecuación (3.11) sobre una función Bloch. Para ello es conveniente escribir éste término en la forma:

$$\vec{\sigma} \left(\vec{\nabla} V(r) \times \vec{p} \right) = \sum_i \sigma_i \left(\vec{\nabla} V(r) \times \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right) \right)_i = \quad (3.12)$$

$$= \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} \sigma_i \left(\frac{\partial V(r)}{\partial x_j} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \quad (3.13)$$

Ahora haciéndolo actuar sobre una función Bloch

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} \sigma_i \left(\frac{\partial V(r)}{\partial x_j} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}} = \\ & = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \sum_{i,j,k} \epsilon_{mij} \sigma_i \left(\frac{\partial V(r)}{\partial x_j} \right) \left(\hbar k_k - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \\ & = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left[\vec{\sigma} \left(\vec{\nabla} V(r) \times \hbar \vec{k} \right) + \vec{\sigma} \left(\vec{\nabla} V(r) \times \vec{p} \right) \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \\ & = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left[\hbar \vec{k} \cdot \left(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{\sigma} \cdot \vec{l} \right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.14) \end{aligned}$$

Por lo tanto puede escribirse una ecuación para las funciones $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ muy parecida a la ecuación (3.8)

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \vec{\pi} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{\sigma} \cdot \vec{l} \right] u_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}} \quad (3.15)$$

Siendo

$$\vec{\pi} = \vec{p} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \left[\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r) \right] \quad (3.16)$$

3.2. Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ en base de estados propios en el punto Γ

3.2.1. Funciones de celda y simetrías

Debido a la simetría de traslación del sistema, dada por la red de Bravais, los estados propios del hamiltoniano serán funciones tipo Bloch: $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$. Teniendo también en cuenta el grupo puntual de simetrías $G_0 = \{M\}$ veamos como actúan sobre las funciones de celda

$$u^{T_{\vec{R}}}(\vec{r}) = u(T_{\vec{R}}^{-1}(\vec{r})) = u(\vec{r} - \vec{R}) = u(r) \quad (3.17)$$

$$u^{M_i}(\vec{r}) = u(M_i^{-1}(\vec{r})) \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} u^{M_i}(\vec{r} + \vec{R}) &= u(M_i^{-1}(\vec{r} + \vec{R})) = u(M_i^{-1}\vec{r} + M_i^{-1}\vec{R}) \\ &= u(M_i^{-1}\vec{r} + \vec{R}') \Rightarrow \\ u^{M_i}(\vec{r}) &= u^{M_i}(\vec{r} + \vec{R}) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Dado que $G_0 = \{M_i\}$ es grupo puntual de simetría del cristal se tiene que $M_i^{-1}\vec{R} = \vec{R}'$ y por lo tanto queda demostrado que las operaciones de simetría mantienen las propiedades de traslacionalidad por vector de red de las funciones de celda $u(\vec{r})$.

Supongamos ahora que las funciones de celda se comportan como orbitales atómicos y que las podemos clasificar como $u_s, u_{p_i}, u_{d_{ij}}, \dots$ con $i, j = 1, 2, 3$. Los orbitales tipo s son de la forma $f_s(r)$, las de tipo p_i son $x_i f_p(r)$, las de tipo $d_{x^2-y^2}$

son $(x^2 - y^2)f_d(r)$... pero como las funciones de celda deben tener la periodicidad de la red, deberán ser:

$$u_s(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} f_s(|\vec{r} - \vec{R}|) \quad (3.20)$$

$$u_{p_i}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} (x_i - R_i) f_p(|\vec{r} - \vec{R}|), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.21)$$

$$u_{d_{ij}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} (x_i - R_i)(x_j - R_j) f_d(|\vec{r} - \vec{R}|), \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.22)$$

$$u_{f_{ijk}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} (x_i - R_i)(x_j - R_j)(x_k - R_k) f_f(|\vec{r} - \vec{R}|), \quad i, j, k = 1, 2, 3 \quad (3.23)$$

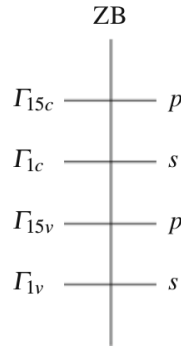


Figura 3.1: Estados en el punto Γ para típicos materiales Zinc-Blenda.

Es sencillo demostrar que estas funciones tienen la periodicidad de la red simplemente viendo

$$u_i(\vec{r} + \vec{R}_1) = \sum_{\vec{R}} f_i(|\vec{r} + \vec{R}_1 - \vec{R}|) = \sum_{\vec{R}'} f_i(|\vec{r} - \vec{R}'|) = u_i(\vec{r}) \quad (3.24)$$

Siendo $\vec{R}' = \vec{R} - \vec{R}_1$ también vector de red.

3.2.2. Aplicación a materiales zinc-blenda

Planteamiento general

Particularizando para semiconductores con estructura de red tipo diamante o zinc-blenda que son cristales FCC cuyo grupo puntual de simetrías es el T_d con

24 elementos:

$$T_d = \{E, 4\{C_3^1, C_3^2\}, 3\{C_2^i\}, 6\{\sigma_d^i\}, 3\{S_4^1, S_4^3\}\} \quad (3.25)$$

La identidad E, ejes ternarios coincidentes con las 4 diagonales del cubo, ejes binarios que coinciden con los 3 ejes que unen centros de caras, 6 planos de reflexión que pasan por aristas opuestas y reflexiones-rotaciones cuaternarias en torno a los ejes que unen centros de caras.

Los generadores de este grupo son:

$$C_3^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_4^1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_d^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Mediante sucesivas aplicaciones de estos operadores se obtienen las 24 transformaciones. Pero esa es la actuación de los generadores sobre las coordenadas, en una base de orbitales $\{\psi_s, \psi_{p_x}, \psi_{p_y}, \psi_{p_z}\}$ deberá ocurrir:

$$\begin{pmatrix} \psi'_s \\ \psi'_{p_x} \\ \psi'_{p_y} \\ \psi'_{p_z} \end{pmatrix} = M_i \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_{p_x} \\ \psi_{p_y} \\ \psi_{p_z} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

La forma de los generadores en esta base es:

$$C_3^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_4^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_d^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

En la siguiente cuadro se representa la tabla de caracteres del grupo T_d y las funciones s, p_i, d_{ij}, f_{ijk} , $i, j = 1, 2, 3$ que pertenecen a los subespacios funcionales invariantes inducidos por dichas representaciones.

T_d	E	$3C_2$	$8C_3$	$6S_4$	$6\sigma_d$	
Γ_1	1	1	1	1	1	s, xyz
Γ_2	1	1	1	-1	-1	
Γ_{12}	2	2	-1	0	0	$s, x^2 - y^2, 3z^2 - r^2$
Γ_{15}	3	-1	0	-1	1	x, y, z, xy, xz, yz
Γ_{25}	3	-1	0	1	-1	$J_x, J_y, J_z, \vec{J} = \vec{r} \times \vec{p}$

Cuadro 3.1: Tabla de caracteres y algunas funciones de las representaciones irreducibles

Al aplicar el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ será necesario calcular términos de matriz de la parte del hamiltoniano $H_{\vec{k} \cdot \vec{p}}$ de la forma

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_\alpha | \vec{k} \cdot \vec{p} | \psi_\beta \rangle &= \sum_{i=1}^3 k_i \langle \psi_\alpha | p_i | \psi_\beta \rangle \\
 &= \sum_{i=1}^3 k_i \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi_\beta(\vec{r}) d^3r \\
 &= -i\hbar \sum_{i=1}^3 k_i \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) \frac{\partial \psi_\beta(\vec{r})}{\partial x_i} d^3r
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Lo cual se reduce a calcular términos del tipo

$$\langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial x_i} | \psi_\beta \rangle = \int \psi_\alpha^*(\vec{r}) \frac{\partial \psi_\beta(\vec{r})}{\partial x_i} d^3r \tag{3.30}$$

Para ello se puede hacer uso de resultados de teoría de representaciones irreducibles, que dice que si se tiene un elemento de matriz $\langle \psi_i^l | O^m | \psi_j^n \rangle$ en donde ψ_i^l pertenece al subespacio invariante de la representación irreducible l, O^m pertenece al subespacio invariante de la representación irreducible m y ψ_j^n pertenece al subespacio invariante de la representación irreducible n, dicho elemento de matriz es distinto de cero si en la descomposición del producto de caracteres: $\chi(R) = \sum_i \chi^i(R)$ en representaciones irreducibles i:

- $\chi(R) = \chi^l(R)\chi^m(R)$ aparece la representación irreducible $n \Rightarrow \exists i \mid \chi^i(R) = \chi^n(R)$
- $\chi(R) = \chi^l(R)\chi^m(R)$ aparece la representación irreducible $l \Rightarrow \exists i \mid \chi^i(R) = \chi^l(R)$
- $\chi(R) = \chi^l(R)\chi^m(R)$ aparece la representación irreducible $m \Rightarrow \exists i \mid \chi^i(R) = \chi^m(R)$
- $\chi(R) = \chi^l(R)\chi^m(R)\chi^n(R)$ aparece la representación irreducible totalmente simétrica $m \Rightarrow \exists i \mid \chi^i(R) = 1, \forall R$

Por tanto, podemos deducir que:

- $\langle u_s | p_i | u_s \rangle = 0, i = x, y, z$ ya que $\Gamma_1 \Gamma_{15} = \Gamma_{15}$
- $\langle u_s | p_i | u_{d_{3z^2-r^2}} \rangle = \langle u_s | p_i | u_{d_{x^2-y^2}} \rangle = 0$ pues $\Gamma_1 \Gamma_{15} = \Gamma_{15} \neq \Gamma_{12}$
- $\langle u_s | p_i | u_{p_j} \rangle \neq 0, i, j = x, y, z$ ya que $\Gamma_1 \Gamma_{15} = \Gamma_{15}$
- $\langle u_s | p_i | u_{d_{jk}} \rangle \neq 0, i, j, k = x, y, z; j \neq k$ pues $\Gamma_{15} \Gamma_{15} = \Gamma_1 + \Gamma_{12} + \Gamma_{15} + \Gamma_{25}$
- $\langle u_{p_i} | p_i | u_{p_k} \rangle \neq 0, i, j, k = x, y, z$ ya que $\Gamma_{15} \Gamma_{15} = \Gamma_1 + \Gamma_{12} + \Gamma_{15} + \Gamma_{25}$
- $\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{3z^2-r^2}} \rangle \neq 0, i, j, k = x, y, z$ por lo mismo que el anterior
- $\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{x^2-y^2}} \rangle \neq 0, i, j, k = x, y, z$ por lo mismo
- $\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{kl}} \rangle \neq 0, i, j, k, l = x, y, z$ por lo mismo

Hay términos que se ha concluido que son distintos de cero. En realidad la conclusión que se deriva de los argumentos de teoría de representaciones irreducibles es que no hay razón para decir que sean cero, pero si se es más riguroso y se aplican argumentos de simetría, se ve que algunos de estos términos son nulos.

Términos disintos de cero por operaciones de simetría

Para comprobar si verdaderamente los términos que se han deducido son distintos de cero lo son o no se pueden utilizar argumentos de simetría.

- Términos del tipo $\langle u_s | p_i | u_{p_j} \rangle$

Se tienen dos casos:

- $i = j$

$$\langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_i} \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \left[f_p(r') + x_i'^2 \frac{df_p(r')}{dr'} \right] d^3 r' \quad (3.31)$$

Como las rotaciones en torno a ejes ternarios C_3^1, C_3^2 convierten unas coordenadas en otras, $x_i \rightarrow x_j, x_j \rightarrow x_k, x_k \rightarrow x_i$ (con permutaciones y cambios de signos) y las demás o mantienen x_i ó $x_i \rightarrow -x_i$ ó $x_i \rightarrow -x_j, -x_k$ (rotaciones reflexiones) tendremos:

$$\langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_i} \rangle = \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_j} \rangle = \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_k} | u_{p_k} \rangle \neq 0 \quad (3.32)$$

- $i \neq j$

$$\langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_j} \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \left[x_i' x_j' \frac{df_p(r')}{dr'} \right] d^3 r' \quad (3.33)$$

Ahora si se aplica una rotación $C_2^j \in T_d$ alrededor del eje $j \neq i$, teniendo en cuenta todas las consideraciones del caso anterior:

$$\begin{aligned} \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_j} \rangle^{C_2^j} &= \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_j} \rangle = \\ &= - \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \left[x_i' x_j' \frac{df_p(r')}{dr'} \right] d^3 r' = \\ &= - \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_j} \rangle \end{aligned} \quad (3.34)$$

Por lo tanto los términos de matriz $\langle u_s | p_i | u_{p_j} \rangle$, $i \neq j$ son nulos.

- Términos del tipo $\langle u_{p_i} | p_j | u_{p_k} \rangle$

Se tienen dos casos:

- $j = k$

$$\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_j} \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int (x_i' - R_i'') f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \left[f_p(r') + x_j'^2 g_p(r') \right] d^3 r' \quad (3.35)$$

Para el caso $i = j$, al transformar el elemento de matriz por C_2^k se tiene:

$$\begin{aligned}
\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_i} \rangle^{C_2^k} &= \langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_i} \rangle = \\
&= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int [-(x'_i - R'_i)] f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) [f_p(r') + x_i'^2 g_p(r')] d^3 r' = \\
&= -\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_i} \rangle = 0
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Y lo mismo pasa para el caso $j \neq i$: $\langle u_{p_i} | p_j | u_{p_j} \rangle = 0$

- $j \neq k$

$$\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_k} \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int (x'_i - R'_i) f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) [x'_j x'_k g_p(r')] d^3 r' \tag{3.37}$$

Si $i = j$ o $i = k$ los términos son nulos. Para verlo, basta aplicar una rotación C_2^i , $i = 1, 2, 3$.

Si $i \neq j \neq k$, como las rotaciones en torno a eje ternarios C_3^1, C_3^2 convierten unas coordenadas en otras, $x_i \rightarrow x_j, x_j \rightarrow x_k, x_k \rightarrow x_i$ (con permutaciones y cambios de signos) y las demás o mantienen x_i ó $x_i \rightarrow -x_i$ ó $x_i \rightarrow -x_j, -x_k$ tendremos:

$$\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_k} \rangle = \langle u_{p_j} | \frac{\partial}{\partial x_k} | u_{p_i} \rangle = \langle u_{p_k} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_j} \rangle \tag{3.38}$$

$$\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_k} | u_{p_j} \rangle = \langle u_{p_j} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_k} \rangle = \langle u_{p_k} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_i} \rangle \tag{3.39}$$

Además, aplicando una reflexión en un plano bisector de los ejes ij tenemos que $\sigma^{ij} \vec{r} = (x_j, x_i, x_k)$ y por lo tanto

$$\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_k} \rangle = \langle u_{p_j} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_k} \rangle \quad (3.40)$$

$$\langle u_{p_k} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_j} \rangle = \langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_k} | u_{p_j} \rangle \quad (3.41)$$

$$\langle u_{p_j} | \frac{\partial}{\partial x_k} | u_{p_i} \rangle = \langle u_{p_k} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_i} \rangle \quad (3.42)$$

Resumiendo, los términos de matriz $\langle u_a | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_b \rangle$ con $a, b = s, p_x, p_y, p_z$ no nulos son:

$$\langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{p_i} \rangle = A \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.43)$$

$$\langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_k} \rangle = B \quad i \neq j \neq k \quad (3.44)$$

y todas las permutaciones i,j,k

- Términos del tipo $\langle u_s | p_i | u_{d_{jk}} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle u_{p_i} | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{d_{jk}} \rangle &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r} - \vec{R}|) \frac{\partial (x_j - R'_j)(x_k - R'_k) f_d(|\vec{r} - \vec{R}'|)}{\partial x_i} d^3r = \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r} - \vec{R}|) [\delta_{ij} x'_k + \delta_{ik} x'_j f_d(r') + x'_j x'_k x'_i g_d(r')] d^3r \end{aligned} \quad (3.45)$$

Aplicando argumentos de simetría tenemos los siguientes casos:

- $i = j = k$

$$\langle u_s | p_i | u_{d_{ii}} \rangle = 0 \quad (3.46)$$

- $j = k \neq i$

$$\langle u_s | p_i | u_{d_{jj}} \rangle = 0 \quad (3.47)$$

- $i = j \neq k$

$$\langle u_s | p_i | u_{d_{ik}} \rangle = 0 \quad (3.48)$$

- $i \neq j \neq k$

$$\langle u_s | p_i | u_{d_{jk}} \rangle \neq 0 \quad (3.49)$$

Por lo tanto la función de onda u_s no acopla con las funciones $u_{d_{3z^2-r^2}}$ ni con $u_{d_{x^2-y^2}}$ pero sí con $u_{d_{xz}}$, $u_{d_{xy}}$ y $u_{d_{yz}}$

- Términos del tipo $\langle u_s | p_i | u_{f_{jkl}} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{f_{jkl}} \rangle &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}''} \int f_s(|\vec{r} - \vec{R}''|) [\{\delta_{ij} x'_k x'_l + \delta_{ik} x'_j x'_l + \delta_{il} x'_j x'_k\} f_f(r') + \\ &+ x'_j x'_k x'_l g_f(r')] d^3 r' \quad j \neq k \neq l \end{aligned} \quad (3.50)$$

Aplicando argumentos de simetría

$$\langle u_s | p_i | u_{f_{jkl}} \rangle = 0 \quad (3.51)$$

- Términos del tipo $\langle u_{p_i} | p_j | u_{d_{k_l}} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle u_s | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{d_{jk}} \rangle &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}''} \int (x'_i - R''_i) f_p(|\vec{r} - \vec{R}''|) [\{\delta_{jk} x'_l + \delta_{jl} x'_k\} f_d(r') + \\ &+ x'_j x'_k x'_l g_d(r')] d^3 r' \end{aligned} \quad (3.52)$$

Aplicando operaciones de simetría se tienen los siguientes casos:

- $i = j = k = l$

$$\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{ii}} \rangle \neq 0 \quad (3.53)$$

- $i = j \neq k = l$

$$\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{kk}} \rangle \neq 0 \quad (3.54)$$

- $i \neq j = k = l$

$$\langle u_{p_i} | p_j | u_{d_{jj}} \rangle = 0 \quad (3.55)$$

- $i \neq j \neq k = l$

$$\langle u_{p_i} | p_j | u_{d_{kk}} \rangle = 0 \quad (3.56)$$

- $i = j = k \neq l$

$$\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{il}} \rangle = 0 \quad (3.57)$$

- $i = j \neq k \neq l$

$$\langle u_{p_i} | p_i | u_{d_{kl}} \rangle = 0 \quad (3.58)$$

- $i \neq j \neq k \neq l$, necesariamente k o l deben ser iguales a i

$$\langle u_{p_i} | p_j | u_{d_{il}} \rangle = 0 \quad (3.59)$$

- $i \neq j = k \neq l$, necesariamente l debe ser igual a i

$$\langle u_{p_i} | p_k | u_{d_{ki}} \rangle = 0 \quad (3.60)$$

Elementos de matriz de $H_{\vec{k}, \vec{p}}$ no nulos para materiales zinc-blenda

$$\blacksquare \langle u_s^c | p_k | u_{p_j}^v \rangle = -iPk_j$$

$$P = \frac{\hbar^2}{m} A \quad (3.61)$$

$$\begin{aligned} A &= \langle u_s^c | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_j}^v \rangle \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r}' - \vec{R}'|) \left[f_p(r') + \frac{x_j'^2}{r'} \frac{df_p}{dr'} \right] d^3 r' \end{aligned} \quad (3.62)$$

$$\blacksquare \langle u_s^c | p_k | u_{p_j}^c \rangle = -iP'k_j$$

$$P' = \frac{\hbar^2}{m} A' \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned} A' &= \langle u_s^c | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_j}^c \rangle \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r}' - \vec{R}'|) \left[f_p'(r') + \frac{x_j'^2}{r'} \frac{df_p'}{dr'} \right] d^3 r' \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\blacksquare \langle u_s^c | p_k | u_{d_{jk}}^c \rangle = -iSk_i \quad i \neq j \neq k$$

$$S = \frac{\hbar^2}{m} C \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} C &= \langle u_s^c | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{d_{jk}}^c \rangle \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int f_s(|\vec{r}' - \vec{R}'|) \left[\frac{x_j' x_k' x_i'}{r'} \frac{df_d}{dr'} \right] d^3 r' \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$\blacksquare \langle u_{p_i}^v | p_k | u_{p_k}^c \rangle = -iQk_j \quad i \neq j \neq k$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{m} B \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} B &= \langle u_{p_i}^v | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{p_k}^c \rangle \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int (x'_i - R''_i) \frac{x'_j x'_k}{r'} f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \frac{df_p}{dr'} d^3 r' \end{aligned} \quad (3.68)$$

- $\langle u_{p_x}^v | H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} | u_{d_{x^2-y^2}}^c \rangle = -i[P_3 - P_4]k_x$
- $\langle u_{p_y}^v | H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} | u_{d_{x^2-y^2}}^c \rangle = +i[P_3 - P_4]k_y$
- $\langle u_{p_x}^v | H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} | u_{d_{3z^2-r^2}}^c \rangle = +i[P_3 - P_4]k_x$
- $\langle u_{p_y}^v | H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} | u_{d_{3z^2-r^2}}^c \rangle = +i[P_3 - P_4]k_y$
- $\langle u_{p_z}^v | H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} | u_{d_{3z^2-r^2}}^c \rangle = i2[P_3 - P_4]k_z$

$$P_3 = \frac{\hbar^2}{m} D \quad (3.69)$$

$$\begin{aligned} D &= \langle u_{p_i}^v | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{d_{ii}}^c \rangle \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int (x'_i - R''_i) \frac{x_j'^3}{r'} f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \frac{df_d}{dr'} d^3 r' \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$P_4 = \frac{\hbar^2}{m} E \quad i \neq j \quad (3.71)$$

$$\begin{aligned} E &= \langle u_{p_i}^v | \frac{\partial}{\partial x_i} | u_{d_{jj}}^c \rangle \quad i \neq j \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int (x'_i - R''_i) \frac{x'_i x_j'^2}{r'} f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \frac{df_d}{dr'} d^3 r' \end{aligned} \quad (3.72)$$

- $\langle u_{p_i}^v | H_{\vec{k} \cdot \vec{p}} | u_{d_{ij}}^c \rangle = -iP_5 k_j \quad i \neq j$

$$P_5 = \frac{\hbar^2}{m} F \quad (3.73)$$

$$\begin{aligned} F &= \langle u_{p_i}^v | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{d_{ij}}^c \rangle \quad i \neq j \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \int (x'_i - R''_i) f_p(|\vec{r}' - \vec{R}''|) \left[x'_i f_d(r') \frac{x'_i x_j'^2}{r'} \frac{df_d}{dr'} \right] d^3 r' \end{aligned} \quad (3.74)$$

Tomando como base $\{s^c, p_x^v, p_z^v, p_z^v\}$ la expresión matricial de $H_{\vec{k}, \vec{p}}$ será

$$H_{\vec{k}, \vec{p} 4 \times 4} = \left(\begin{array}{c|ccc} E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & -iPk_x & -iPk_y & -iPk_z \\ \hline iPk_x & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & 0 \\ iPk_y & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 \\ iPk_z & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{array} \right) \quad (3.75)$$

Tomando como base $\{s^c, p_x^v, p_z^v, p_z^v, p_x^c, p_z^c, p_z^c\}$ la expresión matricial de $H_{\vec{k}, \vec{p}}$ será

$$H_{\vec{k}, \vec{p} 7 \times 7} = \left(\begin{array}{c|ccc|ccc} E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & -iPk_x & -iPk_y & -iPk_z & -iP'k_x & -iP'k_y & -iP'k_z \\ \hline iPk_x & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & 0 & 0 & -iQk_z & -iQk_y \\ iPk_y & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & -iQk_z & 0 & -iQk_x \\ iPk_z & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & -iQk_y & -iQk_x & 0 \\ \hline iP'k_x & 0 & iQk_z & iQk_y & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E'_0 & 0 & 0 \\ iP'k_y & iQk_z & 0 & iQk_x & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E'_0 & 0 \\ iP'k_z & iQk_y & iQk_x & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E'_0 \end{array} \right) \quad (3.76)$$

3.3. Teoría de perturbaciones de Löwdin

No es posible tomar una base completa de autofunciones del hamiltoniano debido a que la dimensión de ésta es infinita, La forma habitual de tratar este problema es tomar una base reducida con tan solo un conjunto de autofunciones del hamiltoniano. Por supuesto, esto implica que los resultados que se obtengan no serán exactos y en muchas ocasiones no son siquiera aceptables.

La teoría de perturbaciones de Löwdin divide el espacio de autofunciones en

dos conjuntos: A, que será la base, y B, que es el resto de autofunciones y trata los estados pertenecientes a B como perturbaciones a los estados A de tal manera que la expresión del hamiltoniano se modifica en la forma:

$$\begin{aligned} \bar{H}_{nm} &\approx H_{nm} + \sum_{\alpha \in B} \frac{H'_{n\alpha} H'_{\alpha m}}{E - E_{\alpha\alpha}} \\ \text{con } H'_{nm} &= H_{nm}(1 - \delta_{nm}) \end{aligned} \quad (3.77)$$

Donde sólo se ha tenido en cuenta el desarrollo hasta segundo orden.

El inconveniente de esta expresión es que el hamiltoniano perturbado depende explícitamente de los autovalores que queremos calcular. Para evitar este problema se puede tomar como E un promedio de las energías de los estados sin introducir por ello grandes errores en los resultados.

Escribiendo nuestro hamiltoniano en la forma $H_{nm} = H_{nm}\delta_{nm} + H'_{nm} = H_{nm}^0 + H_{kp}$ la expresión (3.78) puede reescribirse como:

$$\bar{H}_{nm} \approx H_{nm}^0 + H_{kp_{nm}} + \sum_{\alpha \in B} \left(\frac{H_{kp_{n\alpha}} H_{kp_{\alpha m}}}{\frac{E_n + E_m}{2} - E_{\alpha\alpha}} \right) \quad (3.78)$$

Es interesante notar en esta expresión que la perturbación es inversamente proporcional a la diferencia de energía de los estados y por ello podemos hacer la suma en α solamente a los estados más cercanos en energía a nuestra base sin introducir grandes errores en los resultados.

Por comodidad en la notación denotamos:

$$H_{per} = \sum_{\alpha \in B} \left(\frac{H_{kp_{n\alpha}} H_{kp_{\alpha m}}}{\frac{E_n + E_m}{2} - E_{\alpha\alpha}} \right) \quad (3.79)$$

3.3.1. Expresión matricial del hamiltoniano perturbado

- Hamiltoniano perturbado 4x4

Tomando $A = \{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v\}$ y $B = \{p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$ y haciendo uso de (3.78) se calcula la perturbación que los estados de B producen en los estados A.

$$\langle s^c | H_{per} | s^c \rangle = \frac{P'^2}{E_0 - E'_0} k^2 \quad (3.80)$$

$$\langle p_i^v | H_{per} | p_i^v \rangle = -\frac{Q^2}{E'_0} (k_y^2 + k_z^2) \quad (3.81)$$

$$\langle s^c | H_{per} | p_i^v \rangle = \frac{QP'}{2} \left(\frac{1}{E_0 - E'_0} - \frac{1}{E'_0} \right) k_j k_k \quad (3.82)$$

$$\langle p_i^v | H_{per} | p_j^v \rangle = -\frac{Q^2}{E'_0} k_i k_j \quad (3.83)$$

Ahora si tomamos como B los estados pertenecientes a las representaciones $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}$ y Γ_{25} la expresión matricial del hamiltoniano perturbado es:

$$H_{per_{4 \times 4}} = \begin{pmatrix} Ak^2 & Bk_y k_x & Bk_y k_z & Bk_x k_z \\ \dagger & Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_y \\ \dagger & \dagger & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ \dagger & \dagger & \dagger & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} \quad (3.84)$$

$$L = F + G \quad (3.85)$$

$$M = H_1 + H_2 \quad (3.86)$$

$$N = F - G + H_1 - H_2 \quad (3.87)$$

$$F = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_l^{\Gamma_1} \frac{|\langle p_x^v | p_x | u_l \rangle|^2}{E_{\Gamma_v} - E_l} \quad (3.88)$$

$$G \equiv \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_l^{\Gamma_{12}} \frac{|\langle p_x^v | p_x | u_l \rangle|^2}{E_{\Gamma_v} - E_l} \quad (3.89)$$

$$H_1 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_l^{\Gamma_{15}} \frac{|\langle p_x^v | p_x | u_l \rangle|^2}{E_v - E_l} \quad (3.90)$$

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_l^{\Gamma_{25}} \frac{|\langle p_x^v | p_x | u_l \rangle|^2}{E_v - E_l} \quad (3.91)$$

$$A = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_l^{\Gamma_{15}} \frac{|\langle s^c | p_x | u_l \rangle|^2}{E_c - E_l} \quad (3.92)$$

$$B = \frac{2\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \in \Gamma_{15}} \frac{|\langle s^c | p_x | u_l \rangle|^2}{\frac{E_0 + E_v}{2} - E_l} \quad (3.93)$$

$$(3.94)$$

En estos parámetros las sumas recorren los estados de las distintas representaciones irreducibles excluyendo los estados que pertenecen a A.

- Hamiltoniano perturbado 7x7

Si ahora tomamos como base $A = \{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v, p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$ y B el resto de estados, a los estados $\{s^c, p_i^v\}$ debemos quitarle la perturbación debida a los estados $\{p_i^c\}$ ya que ahora estos forman parte de la base. Los estados $\{p_i^c\}$ los dejamos sin perturbar debido a que no disponemos de valores experimentales de los términos $\langle p_i^c | H_{\vec{k}, \vec{p}} | u_l \rangle$ con $u_l \in B$. Hacer esto está justificado ya que la perturbación debida a estados más distantes en energía es menor y por lo tanto puede despreciarse sin cometer un error demasiado grande.

La matriz del hamiltoniano perturbativo en esta base tendrá la forma:

$$H_{per7 \times 7} = \left(\begin{array}{cccc|ccc} A'k^2 & B'k_yk_x & B'k_yk_z & B'k_xk_z & 0 & 0 & 0 \\ \dagger & Lk_x^2 + M'(k_y^2 + k_z^2) & N'k_xk_y & N'k_xk_y & 0 & 0 & 0 \\ \dagger & \dagger & Lk_y^2 + M'(k_x^2 + k_z^2) & N'k_yk_z & 0 & 0 & 0 \\ \dagger & \dagger & \dagger & Lk_z^2 + M'(k_x^2 + k_y^2) & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (3.95)$$

$$A' = A - \frac{P'^2}{E_0 - E'_0} \quad (3.96)$$

$$B' = B - \frac{QP'}{2} \left(\frac{1}{E_0 - E'_0} - \frac{1}{E'_0} \right) \quad (3.97)$$

$$M' = M + \frac{Q^2}{E'_0} \quad (3.98)$$

$$N' = N + \frac{Q^2}{E'_0} \quad (3.99)$$

3.3.2. Cálculo de masas efectivas mediante el método de perturbaciones de Löwdin

Lo poderoso del método de Löwdin es que aún eligiendo una base muy reducida, de pocos estados, si se tiene en cuenta la perturbación inducida simplemente por los estados más cercanos en energía el resultado que se obtiene para las bandas de energía es bastante acertado.

Recordando la expresión del tensor de masa efectiva inversa

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (3.100)$$

Para el cálculo analítico de masas efectivas es muy útil hacer uso de la teoría de perturbaciones de Löwdin, sobre todo para estados degenerados. El procedimiento convencional para calcular la energía de estados degenerados por teoría de

perturbaciones es primero diagonalizar los estados para suprimir la degeneración y luego resolver por teoría de perturbaciones no degenerada.

Masa de electrones

Tomando $A = \{s^c\}$ y $B = \{p_x^v, p_y^v, p_z^v, p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$ y haciendo uso de (3.78) se obtiene la energía del estado s^c perturbado.

$$\begin{aligned} E_{s^c}(\vec{k}) &= E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + k^2 \left(\frac{P^2}{E_0} + \frac{P'^2}{E_0 - E'_0} \right) \\ &= E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(1 + \frac{2m_0 c^2}{\hbar^2 c^2} \left(\frac{P^2}{E_0} + \frac{P'^2}{E_0 - E'_0} \right) \right) = \quad (3.101) \\ &= E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} (1 + Z) \end{aligned}$$

$$\text{Con } Z = (2m_0 c^2)/(\hbar^2 c^2) ((P^2)/(E_0) + (P'^2)/(E_0 - E'_0))$$

Utilizando (3.100) se obtiene el tensor de masa efectiva inversa

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{m} (1 + Z) \delta_{ij} \quad (3.102)$$

E invirtiendo

$$m_{ij} = \frac{1}{1 + Z} \delta_{ij} m \quad (3.103)$$

Huecos ligeros y huecos pesados

Para el calculo de la masa efectiva de los estados p_i^v se toma $A = \{p_x^v, p_y^v, p_z^v\}$ y $B = \{s^c, p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$ y se procede de forma análoga. La diferencia es que ahora la base no tiene un solo estado y por lo tanto se debe construir el hamiltoniano perturbado y diagonalizarlo para obtener sus autovalores.

Aplicando (3.78) se obtiene:

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} k^2 - Ak_x^2 - B(k_y^2 + k_z^2) & -(A+B)k_x k_y & -(A+B)k_x k_z \\ \dagger & k^2 - Ak_y^2 - B(k_x^2 + k_z^2) & -(A+B)k_y k_z \\ \dagger & \dagger & k^2 - Ak_z^2 - B(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} \quad (3.104)$$

Con

$$A = \frac{2m_0c^2}{\hbar^2c^2} \left(\frac{P^2}{E_0} \right) \quad (3.105)$$

$$B = \frac{2m_0c^2}{\hbar^2c^2} \left(\frac{Q^2}{E_0} \right) \quad (3.106)$$

Ahora particularizando para el eje $\vec{k} = (k, 0, 0)$:

$$\bar{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} (1-A)k^2 & 0 & 0 \\ 0 & (1-B)k^2 & 0 \\ 0 & 0 & (1-B)k^2 \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

Del mismo modo se podría particularizar para el eje $\vec{k} = (0, k, 0)$ o $\vec{k} = (0, 0, k)$ obteniéndose los tres mismos autovalores.

Identificando con la expresión (3.100) se obtienen tres tensores isótropos de masa efectiva, dos iguales, correspondientes a los denominados huecos pesados (heavy holes) y otro correspondiente a los huecos ligeros (light holes).

$$M_{hh_{ij}} = \frac{1}{1-A} \delta_{ij} m \quad (3.108)$$

$$M_{lh_{ij}} = \frac{1}{1-B} \delta_{ij} m \quad (3.109)$$

3.4. Término $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$ y de interacción spin-órbita en base de estados propios en el punto Γ

3.4.1. Términos nulos y no nulos del término $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$

El término $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$ tiene dos contribuciones, el término $\vec{k} \vec{p}$, que ya sabemos como actúa sobre los estados de la base y el término $\hbar/(4mc^2) \vec{k} \left[\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r) \right]$, que puede escribirse en la forma:

$$\frac{\hbar}{4mc^2} \vec{k} \left[\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(r) \right] = \frac{\hbar}{4mc^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{k} [\vec{\sigma} \times \vec{r}] = g(r) \sum_{ijl} \epsilon_{ijl} k_i \sigma_j x_l \equiv \tau^{op} \quad (3.110)$$

En esta forma es fácil comprobar que términos son distintos de cero en las bases consideradas.

De acuerdo con la bibliografía este término es muy pequeño y a todos los efectos despreciable, no obstante, se va a tener en cuenta y se comprobará si verdaderamente tiene importancia o no. Para ello, primeramente hay que determinar que términos son nulos y cuales no.

Para simplificar un poco las cuentas, la integral a todos los espacios se restringe primeramente al espacio de coordenadas, si es cero en este espacio, independientemente del valor de la integral en el espacio de espín, el término será nulo. Para aquellos términos que la integral espacial no es nula, habrá que comprobar si la integral en el espacio de espín se anula o no.

- Términos del tipo $\langle u_s | \tau^{op} | u_s \rangle$

$$\langle u_s | \tau^{op} | u_s \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sum_{ijl} \epsilon_{ijl} k_i \sigma_j \int x_l g(r) f_s(|\vec{r} - \vec{R}|) f_s(|\vec{r} - \vec{R}'|) d^3r \quad (3.111)$$

Aplicando el operador σ_d^3 que transforma las coordenadas $\vec{r} \rightarrow (x_2, x_1, x_3)$ aparece un signo menos debido al tensor de Levi-Civita

$$\begin{aligned} \langle u_s | \tau^{op} | u_s \rangle^{\sigma_d^3} &= \langle u_s | \tau^{op} | u_s \rangle = \\ &= - \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sum_{ijl} \epsilon_{ijl} k_i \sigma_j \int x_l g(r) f_s(|\vec{r} - \vec{R}|) f_s(|\vec{r} - \vec{R}'|) d^3r = \\ &= - \langle u_s | \tau^{op} | u_s \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.112)$$

- Términos del tipo $\langle u_{p_a} | \tau^{op} | u_{p_b} \rangle$

$$\langle u_{p_a} | \tau^{op} | u_{p_b} \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sum_{ijl} \epsilon_{ijl} k_i \sigma_j \int x_l g(r) (x_a - R_a) (x_b - R'_b) f_p(|\vec{r} - \vec{R}|) f_p(|\vec{r} - \vec{R}'|) d^3 r \quad (3.113)$$

- $a \neq b$

Aplicando una operación de simetría que intercambie las coordenadas a y b, aparece un signo menos y por lo tanto el término es nulo.

$$\langle u_{p_a} | \tau^{op} | u_{p_b} \rangle = 0 \quad (3.114)$$

- $a = b$

Haciendo lo mismo pero con las coordenadas que no son a, aparece también un signo menos.

$$\langle u_{p_a} | \tau^{op} | u_{p_a} \rangle = 0 \quad (3.115)$$

- Términos del tipo $\langle u_s | \tau^{op} | u_{p_a} \rangle$

$$\langle u_s | \tau^{op} | u_{p_a} \rangle = \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sum_{ijl} \epsilon_{ijl} k_i \sigma_j \int x_l g(r) (x_a - R_a) f_s(|\vec{r} - \vec{R}|) f_p(|\vec{r} - \vec{R}'|) d^3 r \quad (3.116)$$

En principio este término no podemos hacerlo cero aplicando argumentos de simetría.

Veamos que ocurre en el espacio de espín. Para ello recordemos como actúan las matrices de Pauli en este espacio.

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 \quad |+\rangle &= |-\rangle & \sigma_1 |-\rangle &= |+\rangle \\
 \sigma_2 \quad |+\rangle &= i|-\rangle & \sigma_2 |-\rangle &= -i|+\rangle \\
 \sigma_3 \quad |+\rangle &= |+\rangle & \sigma_3 |-\rangle &= -|-\rangle
 \end{aligned} \tag{3.117}$$

Por lo tanto términos tipo $\langle u_s + |\tau^{op}|u_{p_a} + \rangle$ ó $\langle u_s - |\tau^{op}|u_{p_b} - \rangle$ sólo conectan a través de σ_3 .

Y términos del tipo $\langle u_s + |\tau^{op}|u_{p_a} - \rangle$ ó $\langle u_s - |\tau^{op}|u_{p_b} + \rangle$ sólo conectan a través de σ_1 ó σ_2

- Términos tipo $\langle u_s \pm |\tau^{op}|u_{p_a} \pm \rangle$

- $a = 1$

$$\langle u_s \pm |\tau^{op}|u_{p_1} \pm \rangle \propto \langle u_s \pm |k_2 x_1 \sigma_3 |u_{p_1} \pm \rangle = \begin{cases} +C_\pi k_2 & \langle +|+\rangle \\ -C_\pi k_2 & \langle -|-\rangle \end{cases} \tag{3.118}$$

- $a = 2$

$$\langle u_s \pm |\tau^{op}|u_{p_2} \pm \rangle \propto \langle u_s \pm | -k_1 x_2 \sigma_3 |u_{p_2} \pm \rangle = \begin{cases} -C_\pi k_1 & \langle +|+\rangle \\ +C_\pi k_1 & \langle -|-\rangle \end{cases} \tag{3.119}$$

- $a = 3$

$$\langle u_s \pm |\tau^{op}|u_{p_3} \pm \rangle = 0 \tag{3.120}$$

ya que $\epsilon_{i33} = 0$

- Términos tipo $\langle u_s \mp |\tau^{op}|u_{p_a} \pm \rangle$

- $a = 1$

$$\langle u_s \mp |\tau^{op}|u_{p_1} \pm \rangle \propto \langle u_s \mp | -k_3 x_1 \sigma_2 |u_{p_1} \pm \rangle = \begin{cases} -iC_\pi k_3 & \langle -|+\rangle \\ +iC_\pi k_3 & \langle +|-\rangle \end{cases} \tag{3.121}$$

○ $a = 2$

$$\langle u_s \mp | \tau^{op} | u_{p_2} \pm \rangle \propto \langle u_s \mp | k_3 x_2 \sigma_1 | u_{p_2} \pm \rangle = \begin{cases} +C_\pi k_3 & \langle -|+ \rangle \\ +C_\pi k_3 & \langle +|- \rangle \end{cases} \quad (3.122)$$

○ $a = 3$

$$\begin{aligned} \langle u_s \mp | \tau^{op} | u_{p_2} \pm \rangle &\propto \langle u_s \mp | -k_2 x_3 \sigma_1 + k_1 x_3 \sigma_2 | u_{p_3} \pm \rangle \quad (3.123) \\ &= \begin{cases} -C_\pi(k_2 - ik_1) & \langle -|+ \rangle \\ -C_\pi(k_2 + ik_1) & \langle +|- \rangle \end{cases} \quad (3.124) \end{aligned}$$

3.4.2. Forma matricial del término τ^{op}

■ Base 8×8 : $\{s^c \uparrow, s^c \downarrow, p_x^v \uparrow, p_y^v \uparrow, p_z^v \uparrow, p_x^v \downarrow, p_y^v \downarrow, p_z^v \downarrow\}$

$$H_{\tau^{op} 8 \times 8} = \left(\begin{array}{c|ccccccc} 0 & k_2 C_\pi & -k_1 C_\pi & k_2 C_\pi & 0 & ik_3 C_\pi & -(k_2 + ik_1) C_\pi \\ \hline & -ik_3 C_\pi & k_3 C_\pi & -A(k_2 - ik_1) C_\pi & -k_2 C_\pi & k_1 C_\pi & 0 \\ \hline \dagger & & & & 0 & & \end{array} \right) \quad (3.125)$$

3.4.3. Término de espín-órbita

El otro término que aparece al introducir la interacción espín orbita tiene la forma $\lambda \vec{\sigma} \cdot \vec{l}$.

Reescribiéndolo en función del momento angular total:

$$\vec{J} = \vec{\sigma} + \vec{l} \Rightarrow J^2 = \sigma^2 + l^2 + 2\vec{\sigma} \cdot \vec{l} \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{l} = \frac{1}{2}(J^2 - \sigma^2 - l^2) \quad (3.126)$$

La ventaja de escribirlo así es que en el punto Γ , el hamiltoniano conmuta con \vec{J} y por lo tanto se puede encontrar una base común de autovalores de H , J^2 y J_z en la cual el término de espín órbita es diagonal.

Hasta ahora no hemos tenido en cuenta el espín del electrón, ya que H_0 no depende del espín y por lo tanto cada estado está doblemente degenerado, estando un electrón con proyección de espín $s_z = \frac{1}{2}$ y el otro con $s_z = -\frac{1}{2}$. Al tener en cuenta el espín del electrón se debe duplicar la base, teniéndose estados con proyección positiva y estados con proyección negativa.

Siendo la base duplicada $\{s^c \uparrow, s^c \downarrow, p_x^v \uparrow, p_y^v \uparrow, p_z^v \uparrow, p_x^v \downarrow, p_y^v \downarrow, p_z^v \downarrow\}$ ¹ el hamiltoniano, sin tener todavía en cuenta la interacción espín-órbita, tendrá la forma

$$H_{4 \times 4}^{doble} = \left(\begin{array}{c|c|c|c} H_{ss} & 0 & H_{sp^v} & 0 \\ \hline 0 & H_{ss} & 0 & H_{sp^v} \\ \hline H_{sp^v}^\dagger & 0 & H_{p^v p^v} & 0 \\ \hline 0 & H_{sp^v}^\dagger & 0 & H_{p^v p^v} \end{array} \right) \quad (3.127)$$

Siendo

$$H_{4 \times 4} = \left(\begin{array}{c|c} H_{ss} & H_{sp^v} \\ \hline H_{sp^v}^\dagger & H_{p^v p^v} \end{array} \right) \quad (3.128)$$

Ahora bien, esa base no está compuesta por funciones propias de J^2 y J_z , y por tanto el término de interacción de espín órbita no tiene una expresión diagonal.

¹La base se podría haber ordenado en la forma $\{Estados \uparrow, Estados \downarrow\}$, lo cual sería bastante conveniente a la hora de construir el hamiltoniano $H_{4 \times 4}$ en la base duplicada:

$$H_{4 \times 4}^{doble} = \left(\begin{array}{c|c} H_0 & 0 \\ \hline 0 & H_0 \end{array} \right)$$

Sin embargo, esto no es conveniente para la expresión del cambio de base ya que los estados p_i no están agrupados juntos.

Ordenando la base en la forma elegida se obtiene una matriz de cambio de base diagonal por cajas lo que facilita bastante la escritura del programa, sobre todo cuando el cambio de base se realiza entre bases de 14 elementos.

Para ello hay que hacer un cambio de base a la base resultado de acoplar el espín del electrón con su momento angular orbital:

$$\left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{s^c}, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{s^c}, \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{p^v} \right\} \quad (3.129)$$

Para pasar a esta nueva base basta con notar que los armónicos esféricos se escriben en función de los orbitales p_i en la forma:

$$Y_{11} = \frac{-1}{\sqrt{2}}(p_x + ip_y) \quad (3.130)$$

$$Y_{10} = p_z \quad (3.131)$$

$$Y_{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x - ip_y) \quad (3.132)$$

Y los estados de la nueva base se escriben en función de los armónicos esféricos en la forma:

$$|3/2, 3/2\rangle = Y_{11}|+\rangle \quad (3.133)$$

$$|3/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{11}|-\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}|+\rangle \quad (3.134)$$

$$|3/2, -1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}|-\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1-1}|+\rangle \quad (3.135)$$

$$|3/2, -3/2\rangle = Y_{1-1}|-\rangle$$

$$|1/2, 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}|-\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}|+\rangle \quad (3.136)$$

$$|1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}|-\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1-1}|+\rangle \quad (3.137)$$

Los estados tipo s ya se corresponden directamente con los estados

$$s \uparrow = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{s^c} \quad (3.138)$$

$$s \downarrow = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{s^c} \quad (3.139)$$

En el caso de tener en cuenta los estados p^c y tomando como base original $\{s^c \uparrow, s^c \downarrow, p_x^v \uparrow, p_y^v \uparrow, p_z^v \uparrow, p_x^v \downarrow, p_y^v \downarrow, p_z^v \downarrow, p_x^c \uparrow, p_y^c \uparrow, p_z^c \uparrow, p_x^c \downarrow, p_y^c \downarrow, p_z^c \downarrow\}$, el hamiltoniano, sin tener todavía en cuenta la interacción espín-órbita, tendrá la forma

$$H_{7 \times 7}^{doble} = \begin{pmatrix} H_{ss} & 0 & H_{sp^v} & 0 & H_{sp^c} & 0 \\ 0 & H_{ss} & 0 & H_{sp^v} & 0 & H_{sp^v} \\ H_{sp^v}^\dagger & 0 & H_{p^v p^v} & 0 & H_{p^v p^c} & 0 \\ 0 & H_{sp^v}^\dagger & 0 & H_{p^v p^v} & 0 & H_{p^v p^c} \\ H_{sp^c}^\dagger & 0 & H_{p^v p^c}^\dagger & 0 & H_{p^c p^c} & 0 \\ 0 & H_{sp^c}^\dagger & 0 & H_{p^v p^c}^\dagger & 0 & H_{p^c p^c} \end{pmatrix} \quad (3.144)$$

Siendo

$$H_{7 \times 7} = \begin{pmatrix} H_{ss} & H_{sp^v} & H_{sp^c} \\ H_{sp^v}^\dagger & H_{p^v p^v} & H_{p^v p^c} \\ H_{sp^c}^\dagger & H_{p^v p^c}^\dagger & H_{p^c p^c} \end{pmatrix} \quad (3.145)$$

Y la matriz para pasar a la base

$$\left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{s^c}, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{s^c}, \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{p^v}, \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle^{p^c}, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{p^c}, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{p^c}, \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle^{p^c}, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle^{p^c}, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle^{p^c} \right\} \quad (3.146)$$

$$S_T = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{pmatrix} \quad (3.148)$$

Y en esta base, la interacción espín-órbita tiene la forma

$$H_{so14 \times 14} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (0 \cdot \mathbb{I}_{2 \times 2}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda \cdot \mathbb{I}_{2 \times 2}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (-2\lambda \cdot \mathbb{I}_{4 \times 4}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\lambda' \cdot \mathbb{I}_{2 \times 2}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (-2\lambda' \cdot \mathbb{I}_{4 \times 4}) \end{pmatrix} \quad (3.149)$$

3.5. Parámetros y expresiones de los hamiltonianos

3.5.1. Parámetros

Los parámetros que se utilizan en este trabajo están tomados de [3] y se ha tomado la energía de la última banda de valencia, p_i^v como origen de energías.

Parámetro	Valor	Descripción
E_0 (eV)	1.519	Energía del estado s^c
E'_0 (eV)	4.488	Energía de los estados p_i^c
Δ_0 (eV)	0.341	Interacción espín órbita para p_i^v
Δ'_0 (eV)	0.171	Interacción espín órbita para p_i^c
P (eVÅ)	10.493	Término de matriz Ec (61)
P' (eVÅ)	4.780	Término de matriz Ec (63)
Q (eVÅ)	8.165	Término de matriz Ec (67)
C_π (eVÅ)	-0.0034	Término (kpi)
γ_1	6.85	
γ_2	2.10	Parámetros de Luttinger
γ_3	2.90	

Cuadro 3.2: Parámetros del hamiltoniano tomados de [3].

Los parámetros Δ_0 son la separación que produce la interacción espín-órbita en los estados p_i y se relacionan con los parámetros λ mediante la fórmula:

$$\lambda = \frac{\Delta_0}{3} ; \quad \lambda' = \frac{\Delta'_0}{3} \quad (3.150)$$

Los parámetros γ_1 , γ_2 y γ_3 son los denominados parámetros de Luttinger y se relacionan con los parámetros L , M y N por las fórmulas

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 4\gamma_2 + 1) \quad (3.151)$$

$$M = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2 + 1) \quad (3.152)$$

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0}6\gamma_3 \quad (3.153)$$

3.5.2. Expresiones de los hamiltonianos

Debido a que la expresión explícita del hamiltoniano sería muy grande y engorrosa lo que se ha hecho es dividir el hamiltoniano en términos de modo que el hamiltoniano es la suma de estos términos. Así pues, para cada una de las bases consideradas se tiene que las expresiones del hamiltoniano son:

- Hamiltoniano $H_{4 \times 4}$: base $\{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v\}$

$$H_{4 \times 4} = H_{04 \times 4} + H_{per_{4 \times 4}} + H_{\vec{k} \cdot \vec{p}_{4 \times 4}} \quad (3.154)$$

- Hamiltoniano $H_{7 \times 7}$: base $\{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v, p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$

$$H_{7 \times 7} = H_{07 \times 7} + H_{per_{7 \times 7}} + H_{\vec{k} \cdot \vec{p}_{7 \times 7}} \quad (3.155)$$

- Hamiltoniano $H_{8 \times 8}$: base $\{|JJ_z\rangle\}$

$$H_{8 \times 8} = S_{T_{8 \times 8}}^{-1} H_{4 \times 4}^{doble} S_{T_{8 \times 8}} + H_{so_{8 \times 8}} \quad (3.156)$$

- Hamiltoniano $H_{8 \times 8(kpi)}$: base $\{|JJ_z\rangle\}$

$$H_{8 \times 8} = S_{T_{8 \times 8}}^{-1} (H_{4 \times 4}^{doble} + H_{\tau^{op}_{8 \times 8}}) S_{T_{8 \times 8}} + H_{so_{8 \times 8}} \quad (3.157)$$

- Hamiltoniano $H_{14 \times 14}$: base $\{|JJ_z\rangle\}$

$$H_{14 \times 14} = S_{T_{14 \times 14}}^{-1} H_{7 \times 7}^{doble} S_{T_{14 \times 14}} + H_{so_{14 \times 14}} \quad (3.158)$$

3.6. Estados propios del hamiltoniano y J_z

Desarrollando el conmutador de J_z y $\vec{k} \cdot \vec{p}$ se tiene

$$\begin{aligned}
 [J_z, \vec{k} \cdot \vec{p}] &= [L_z, \vec{k} \cdot \vec{p}] + \cancel{[s_z, \vec{k} \cdot \vec{p}]}^0 = \left[L_z, \sum_i k_i p_i \right] = \\
 &= \left[x_1 p_2 - x_2 p_1, \sum_i k_i p_i \right] = [x_1 p_2, k_1 p_1] + \cancel{[x_1 p_2, k_2 p_2]}^0 + \\
 &+ \cancel{[x_1 p_2, k_3 p_3]}^0 = -[x_2 p_2, k_1 p_1] - [x_2 p_2, k_2 p_2] - \cancel{[x_2 p_2, k_3 p_3]} = \\
 &= i\hbar(k_1 p_2 - k_2 p_1) \tag{3.159}
 \end{aligned}$$

Por lo tanto, en general J_z no conmuta con $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Pero para ciertos puntos y ejes se tiene:

- Punto Γ $\vec{k} = (0, 0, 0) \rightarrow [J_z, \vec{k} \cdot \vec{p}] = 0$
- Eje Δ $\vec{k} = (0, 0, k) \rightarrow [J_z, \vec{k} \cdot \vec{p}] = 0$

Cabe añadir que en general los autoestados del hamiltoniano no son autoestados de $|J, J_z\rangle$ pero en la notación se ha utilizado la notación espectroscópica refiriéndose al estado sin perturbar en el punto *Gamma*.

Capítulo 4

Resultados

4.1. Bandas de energía

- Hamiltoniano $H_{4 \times 4}$

Representando los datos obtenidos considerando la base $\{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v\}$ y sin tener en cuenta la interacción espín-órbita se obtienen las siguientes gráficas.

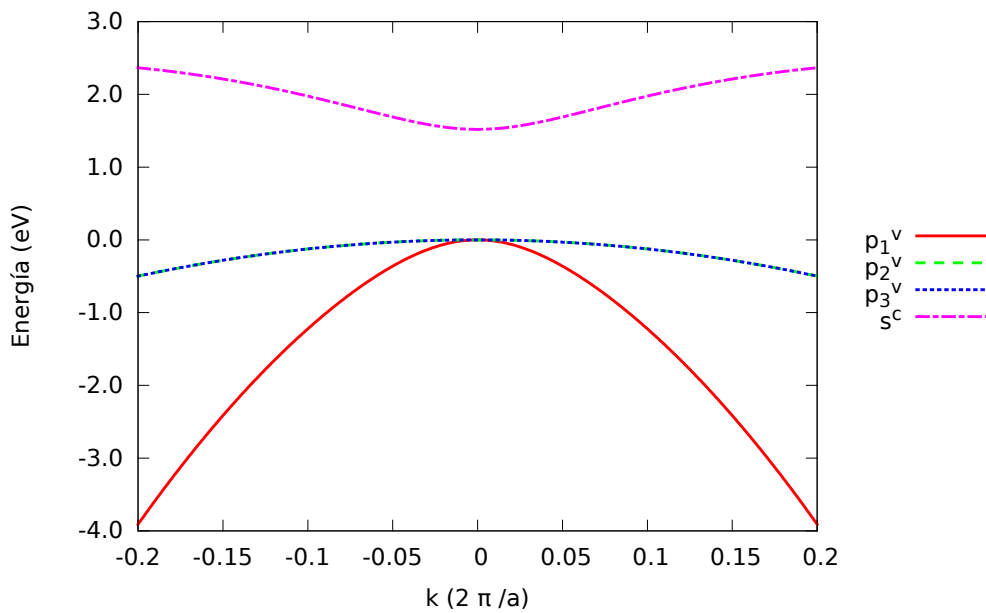


Figura 4.1: Bandas de energía para $H_{4 \times 4}$ a lo largo del eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$

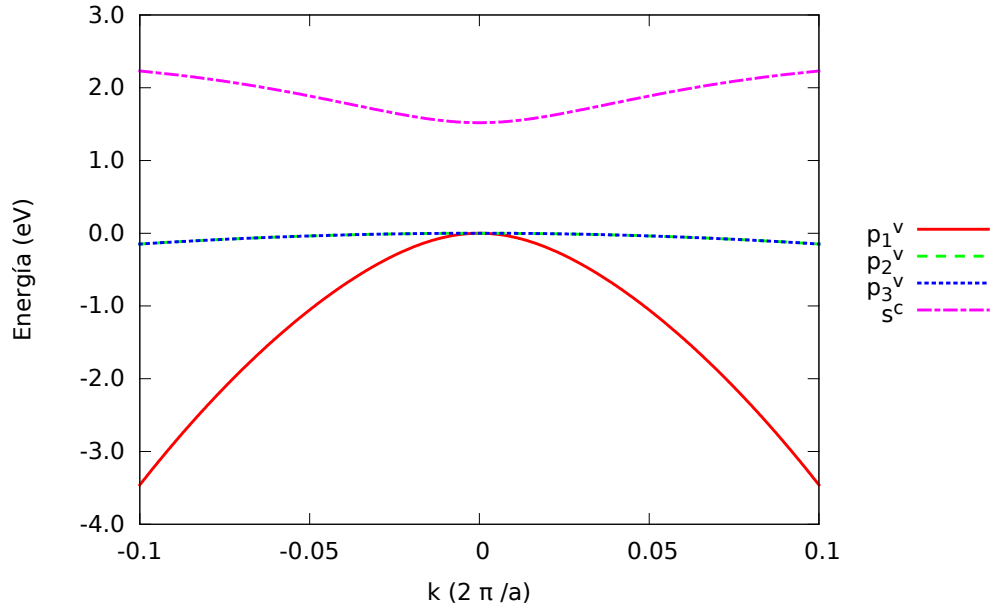


Figura 4.2: Bandas de energía para $H_{4 \times 4}$ a lo largo del eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$

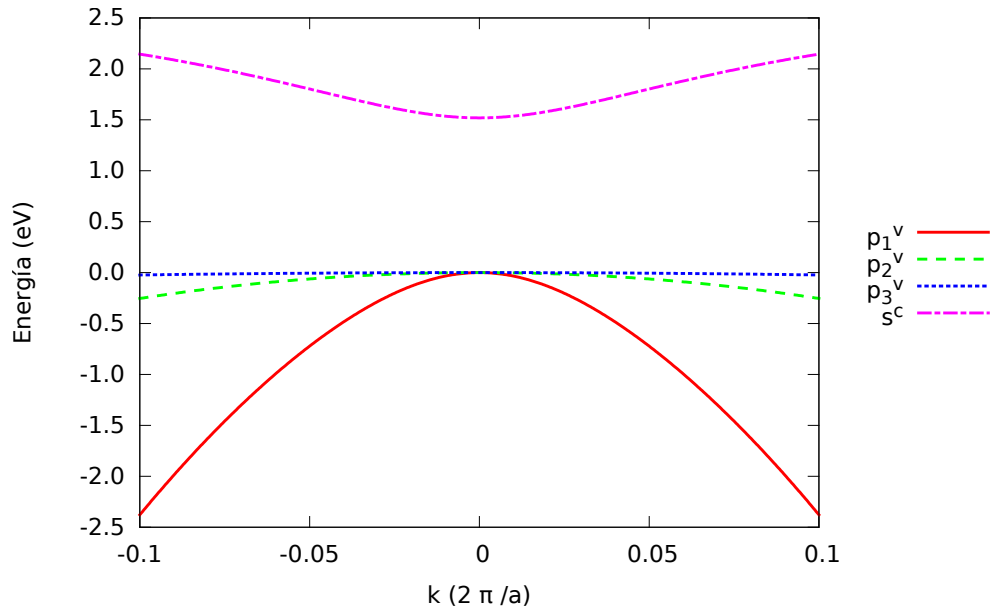


Figura 4.3: Bandas de energía para $H_{4 \times 4}$ a lo largo del eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$

- Hamiltoniano $H_{7 \times 7}$

Representando ahora los datos obtenidos al considerar la base $\{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v, p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$ y sin tener en cuenta la interacción espín-órbita

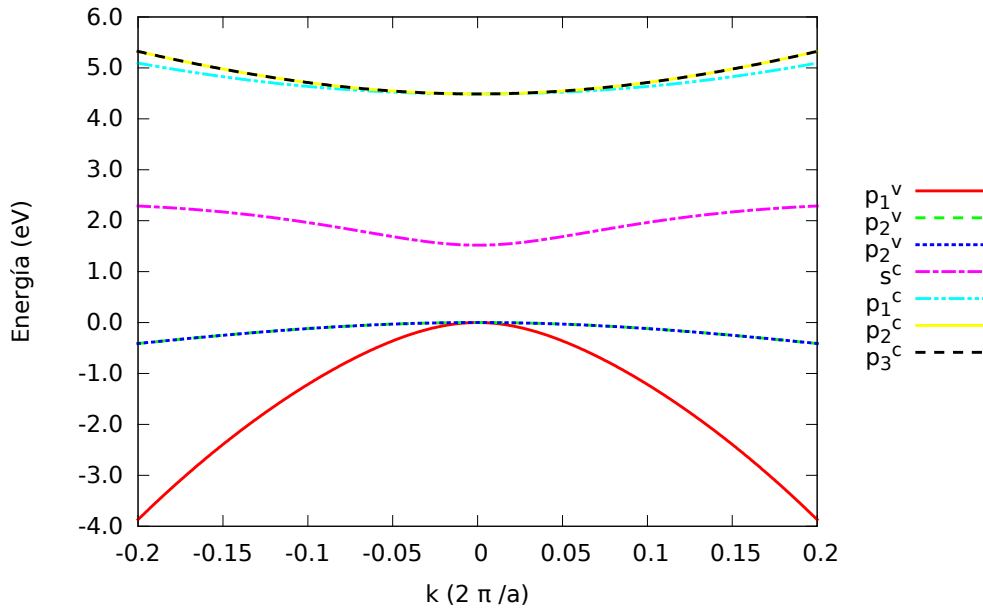


Figura 4.4: Bandas de energía para $H_{7 \times 7}$ a lo largo del eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$

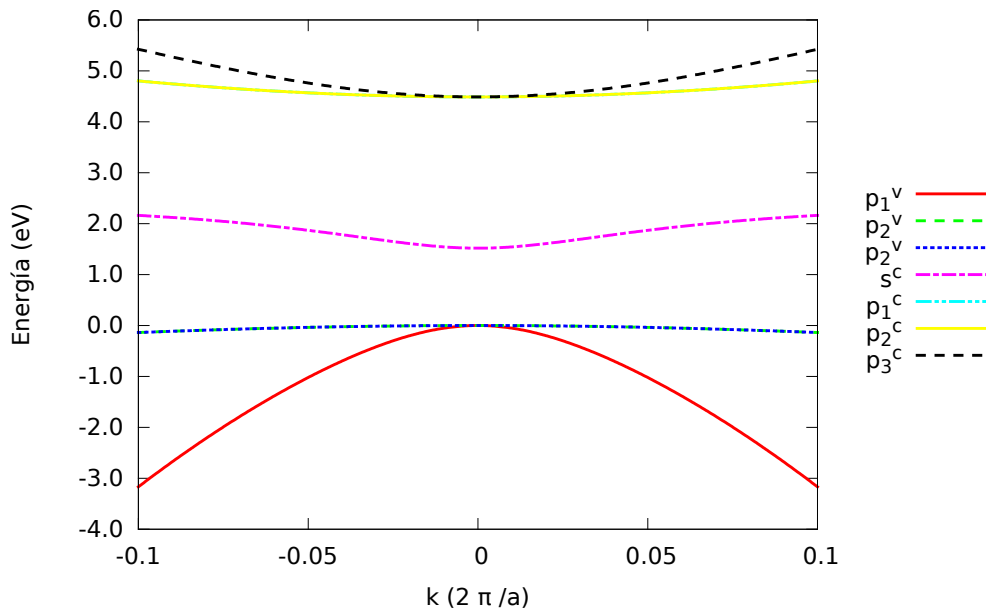


Figura 4.5: Bandas de energía para $H_{7 \times 7}$ a lo largo del eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$

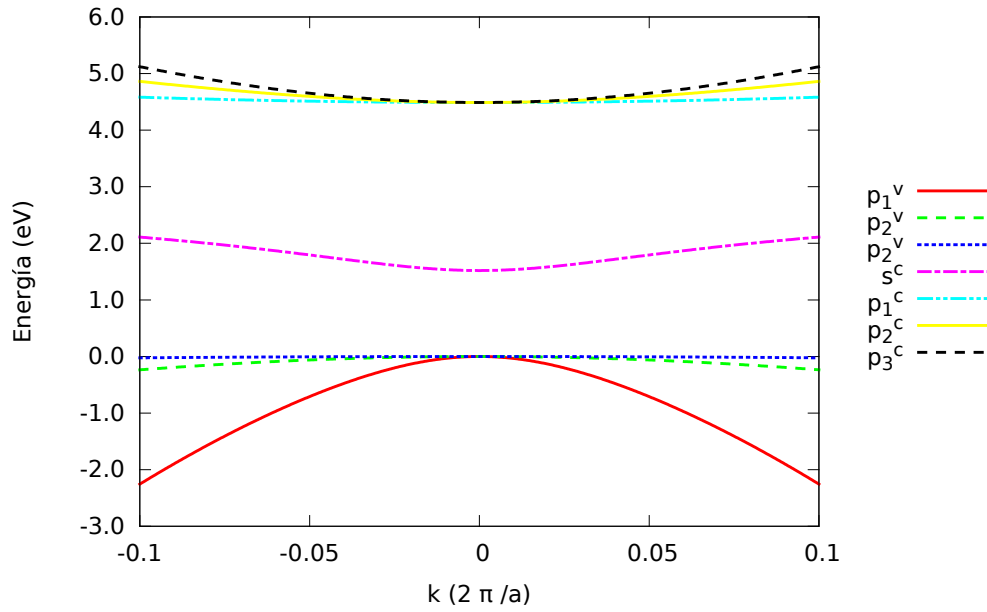


Figura 4.6: Bandas de energía para $H_{7 \times 7}$ a lo largo del eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$

■ Hamiltoniano $H_{8 \times 8}$

Teniendo en cuenta la interacción espín-órbita en la base $\{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^v\}$

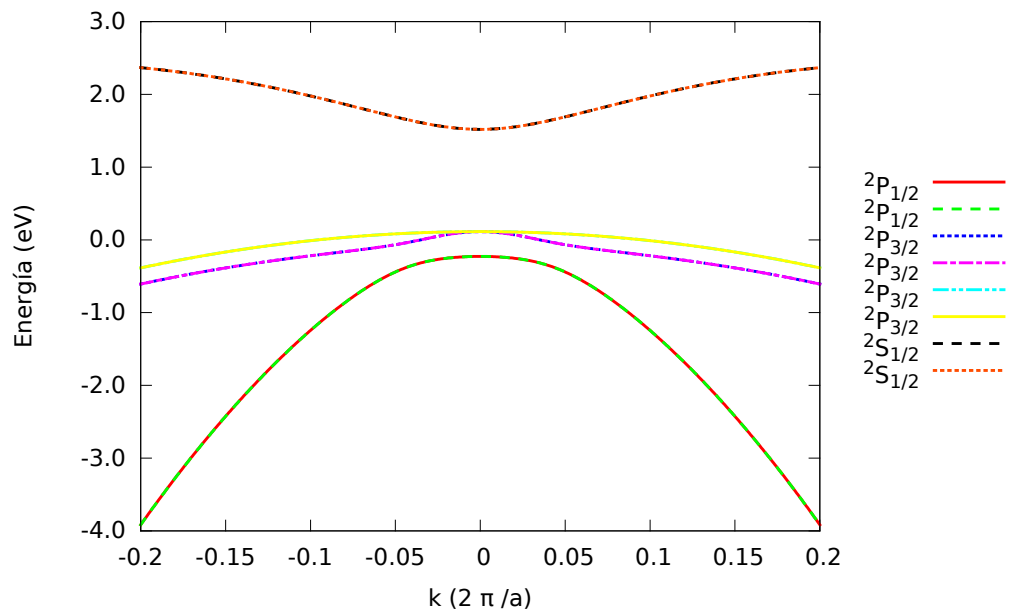


Figura 4.7: Bandas de energía para $H_{8 \times 8}$ a lo largo del eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$

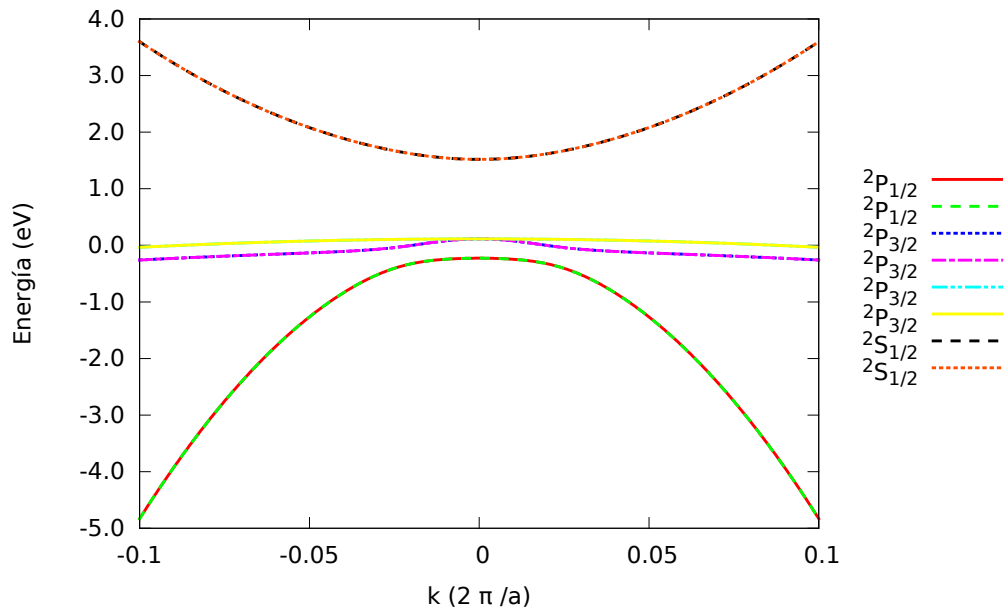


Figura 4.8: Bandas de energía para $H_{8 \times 8}$ a lo largo del eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$

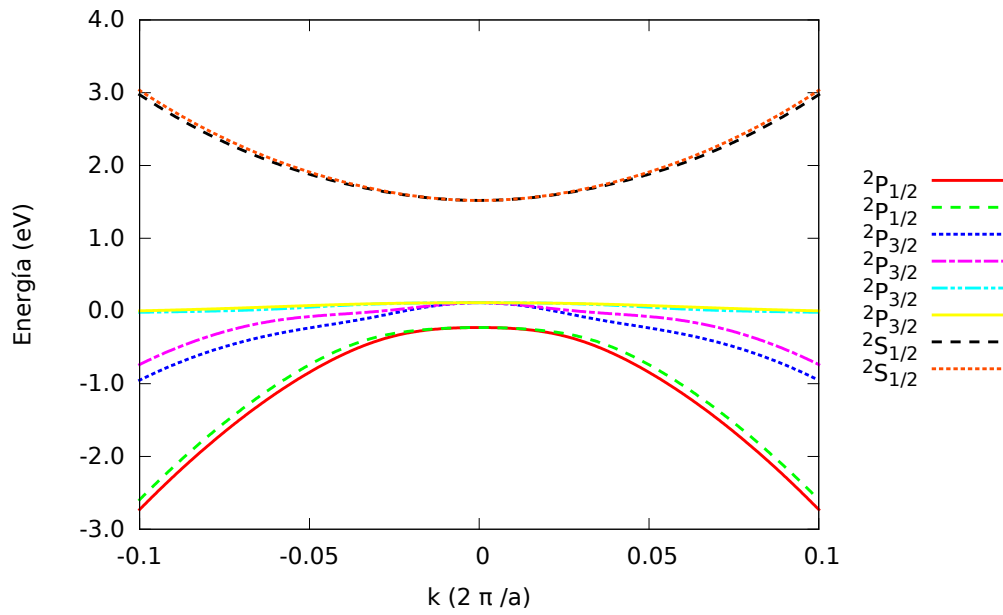


Figura 4.9: Bandas de energía para $H_{8 \times 8}$ a lo largo del eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$

- Hamiltoniano $H_{8 \times 8(k\pi)}$

Teniendo en cuenta el término $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$

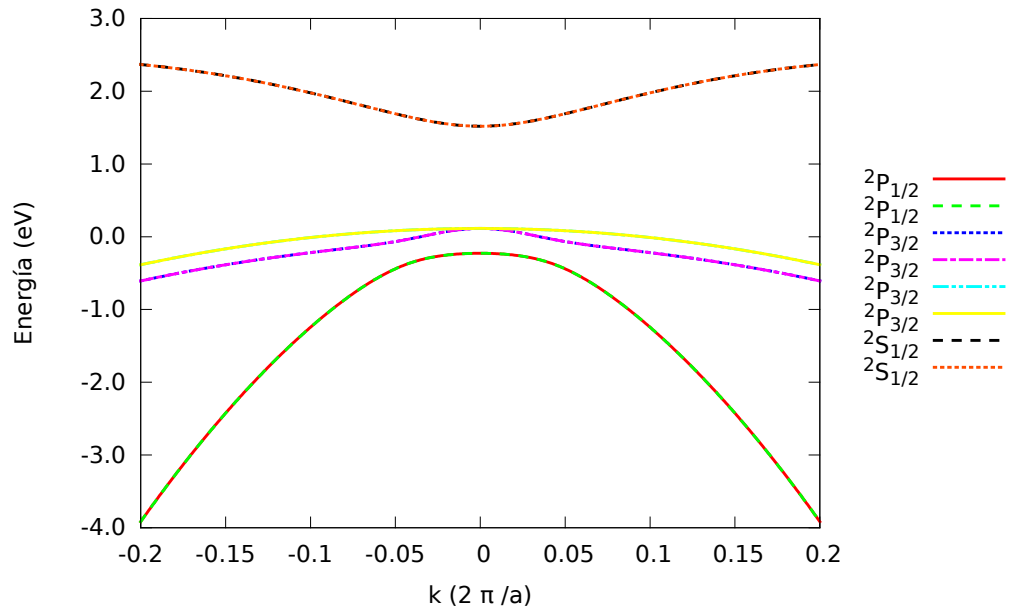


Figura 4.10: Bandas de energía para $H_{8 \times 8(k\pi)}$ a lo largo del eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$

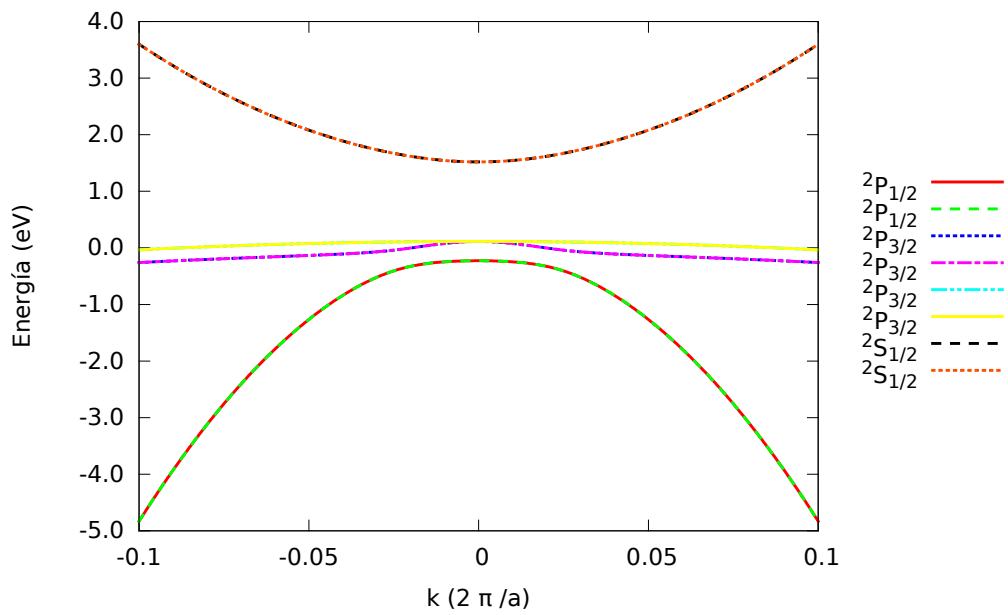


Figura 4.11: Bandas de energía para $H_{8 \times 8(k\pi)}$ a lo largo del eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$

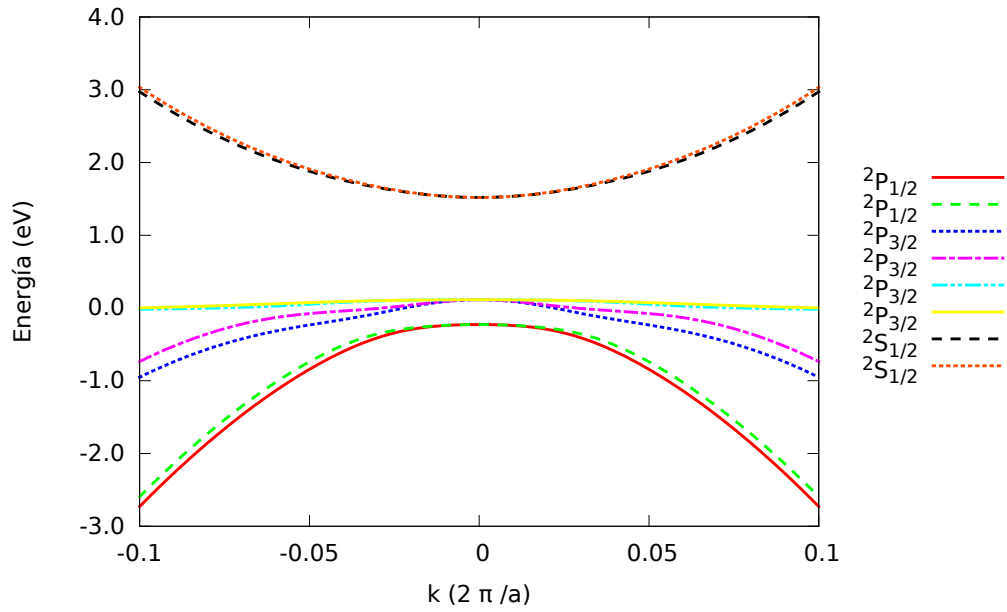


Figura 4.12: Bandas de energía para $H_{8 \times 8(k\pi)}$ a lo largo del eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$

■ Hamiltoniano $H_{14 \times 14}$

Teniendo en cuenta la interacción espín-órbita en la base $\{s^c, p_x^v, p_y^v, p_z^c, p_x^c, p_y^c, p_z^c\}$

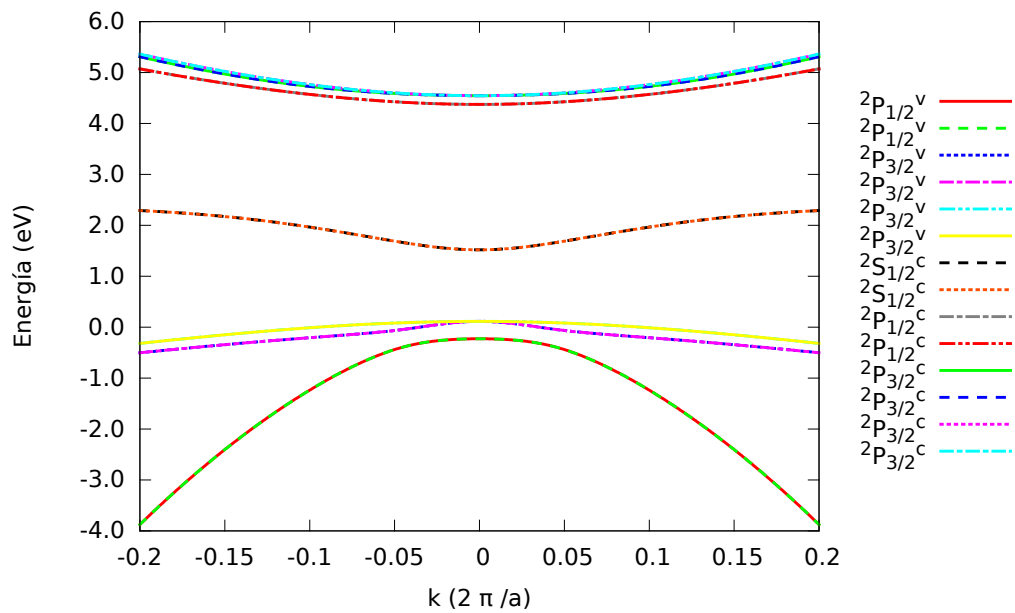


Figura 4.13: Bandas de energía para $H_{14 \times 14}$ a lo largo del eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$

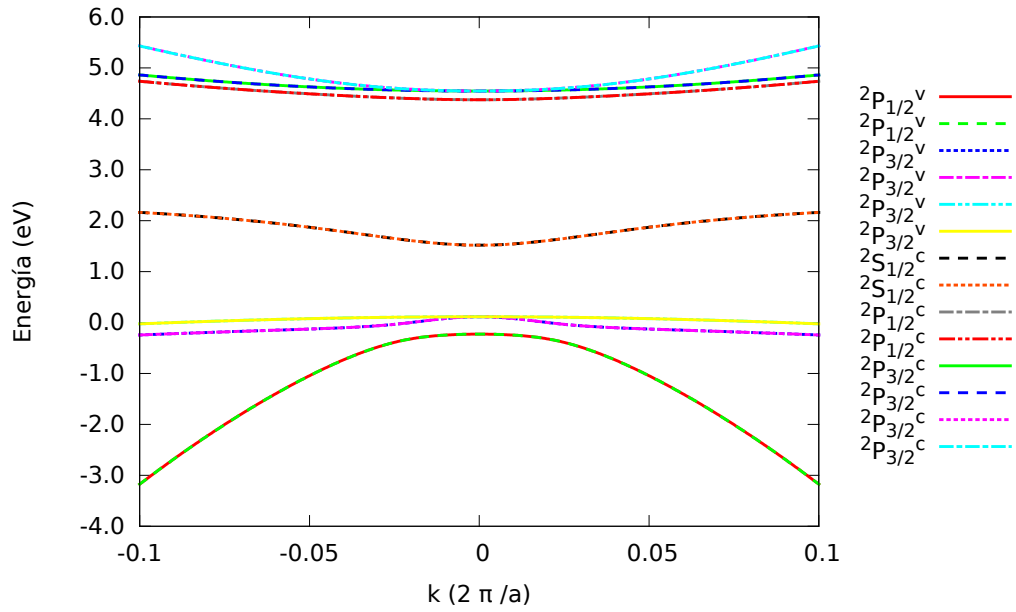


Figura 4.14: Bandas de energía para $H_{14 \times 14}$ a lo largo del eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$

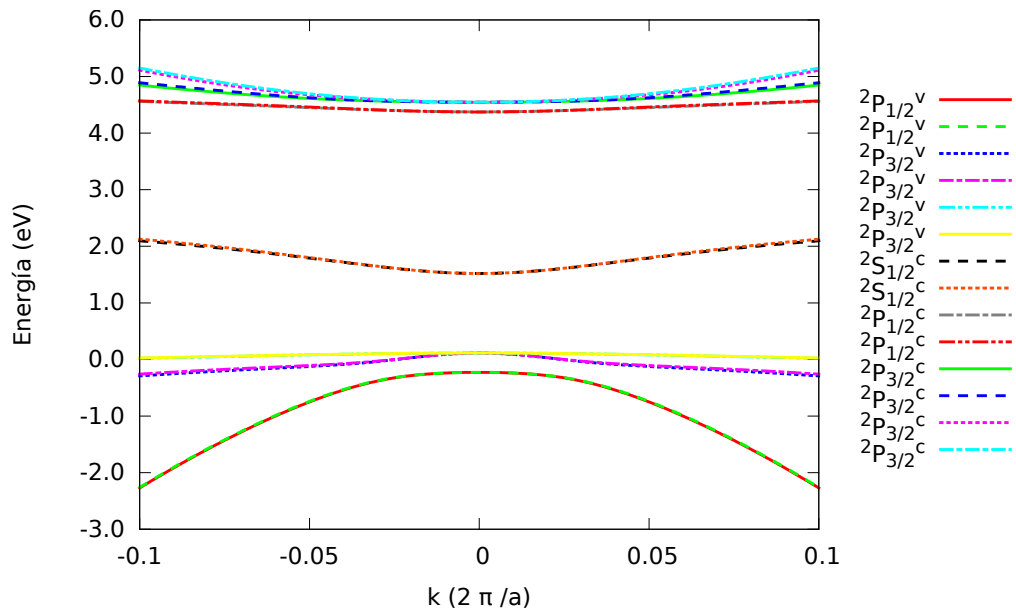


Figura 4.15: Bandas de energía para $H_{14 \times 14}$ a lo largo del eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$

4.2. Superficies isoenergéticas

Mediante un programa que va barriendo el plano $(k_x, k_y, 0)$ y calculando el valor de la energía para cada banda en cada punto, se obtiene un conjunto de datos que nos permite hacernos una idea de la forma de las bandas. Estos datos se

pueden visualizar en dos formas: la primera es una representación tridimensional en la que el eje z corresponde a la energía del punto y la segunda es una gráfica de contorno en la que el valor de la energía viene representado por el color, de tal forma que aparecen líneas isoenergéticas correspondientes a cortes perpendiculares al eje z en la representación tridimensional.

■ Hamiltoniano $H_{4 \times 4}$

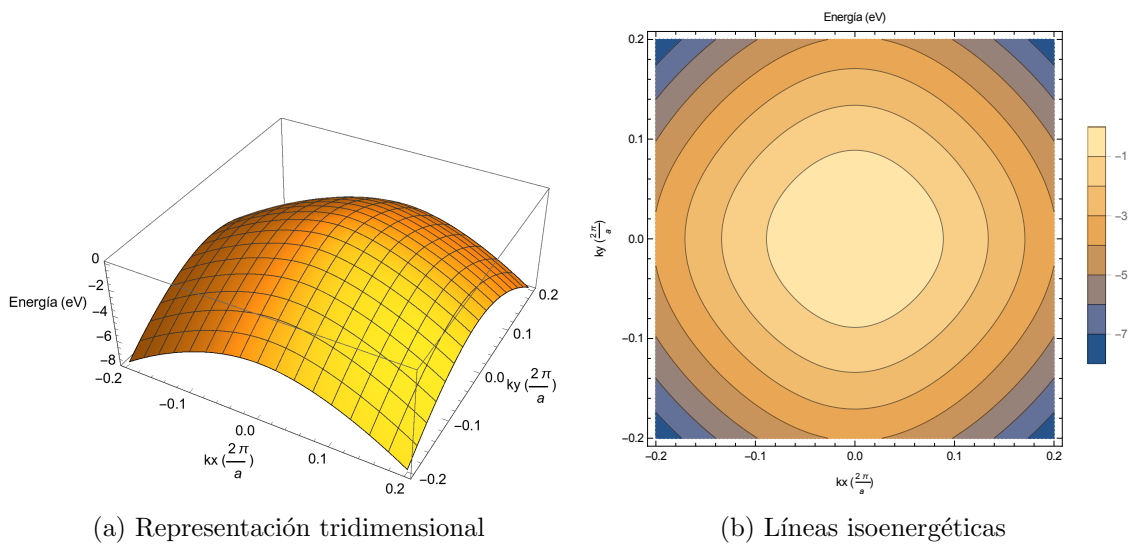


Figura 4.16: Primera banda tipo p^v para $H_{4 \times 4}$

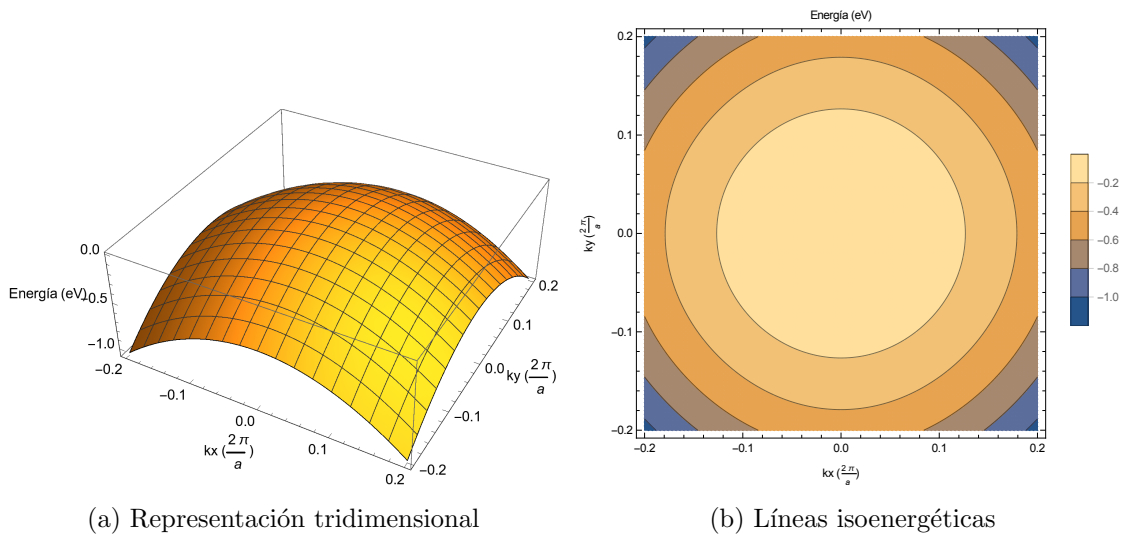


Figura 4.17: Segunda banda tipo p^v para $H_{4 \times 4}$

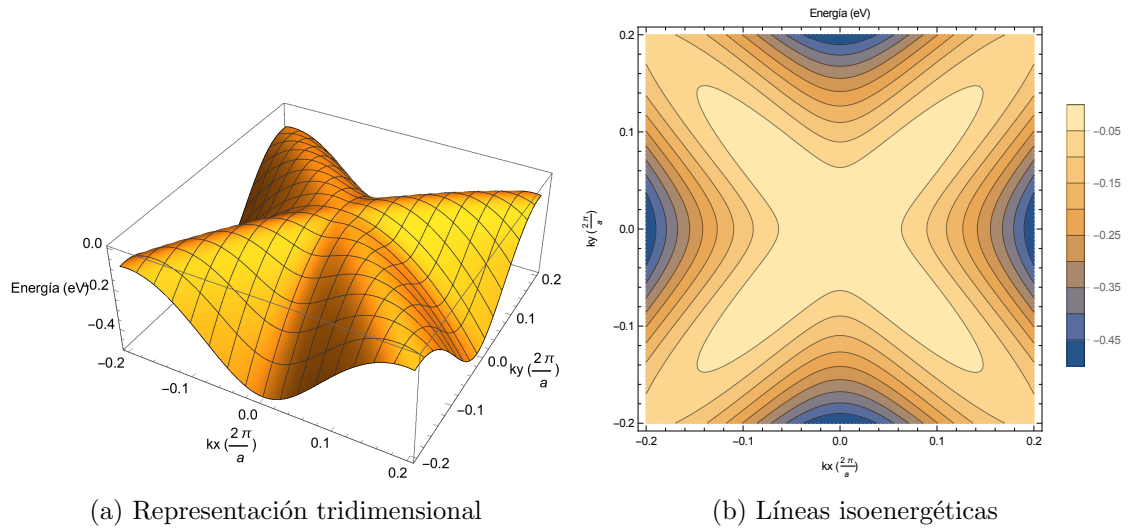


Figura 4.18: Tercera banda tipo p^v para $H_{4 \times 4}$

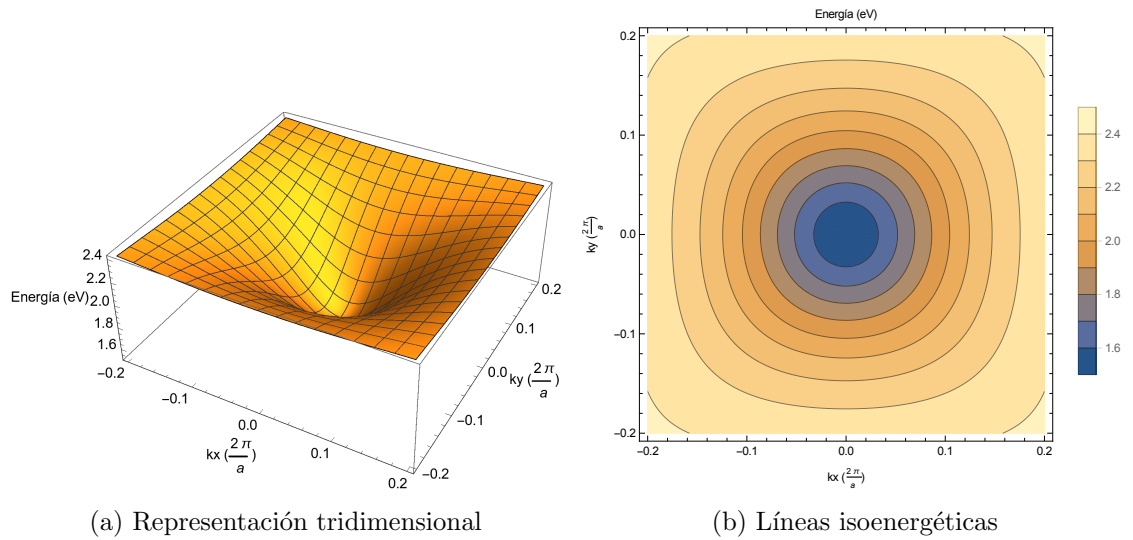


Figura 4.19: Banda tipo s^c para $H_{4 \times 4}$

Observando estas últimas gráficas se puede decir que la primera, segunda y cuarta banda son bandas bastante esféricas mientras que la tercera banda muestra una forma estrellada.

■ Hamiltoniano $H_{7 \times 7}$

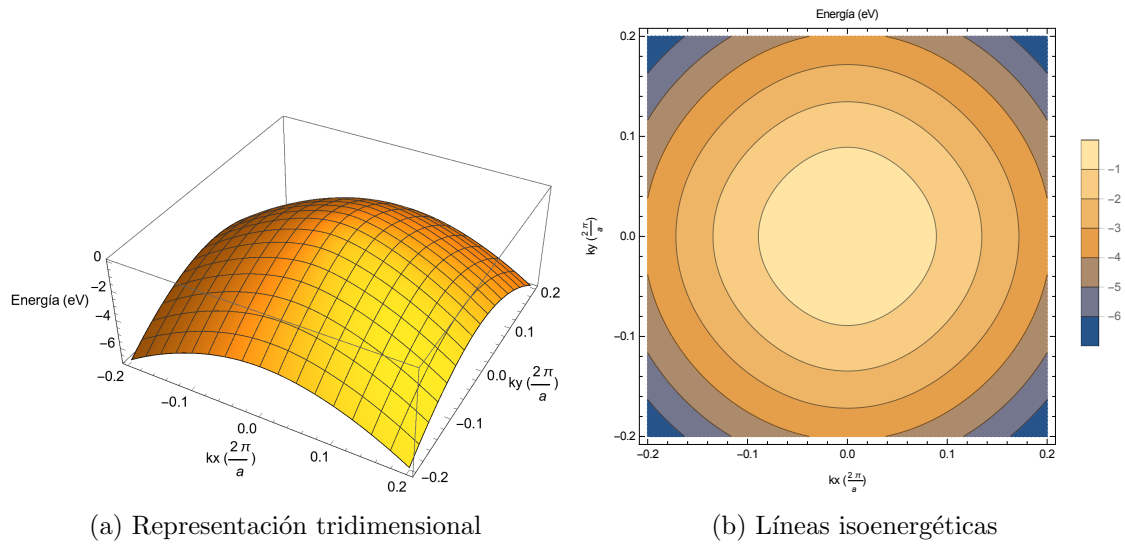


Figura 4.20: Primera banda tipo p^v para $H_{7 \times 7}$

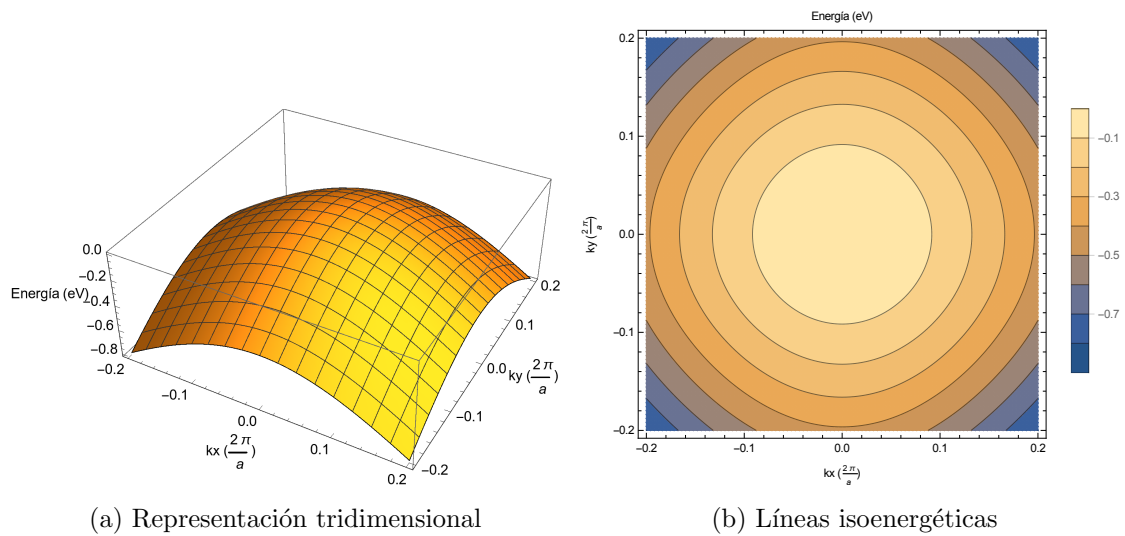


Figura 4.21: Segunda banda tipo p^v para $H_{7 \times 7}$

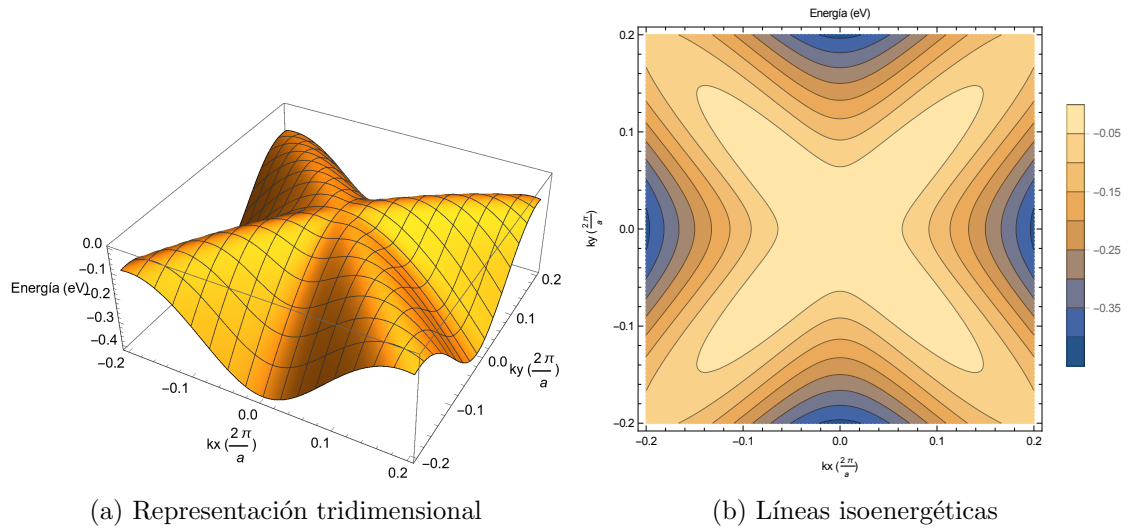


Figura 4.22: Tercera banda tipo p^v para $H_{7 \times 7}$

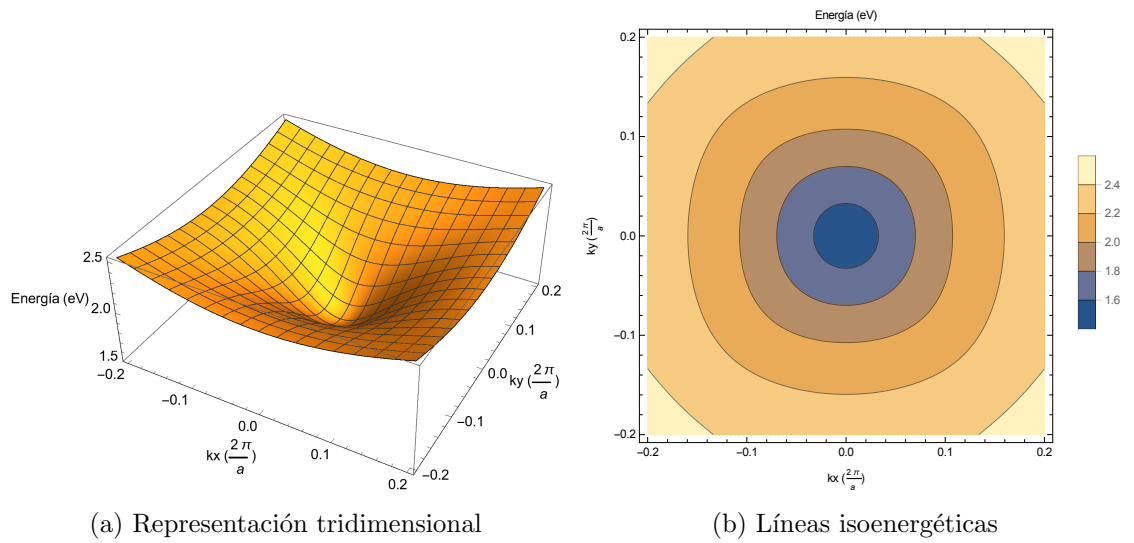


Figura 4.23: Banda tipo s^c para $H_{7 \times 7}$

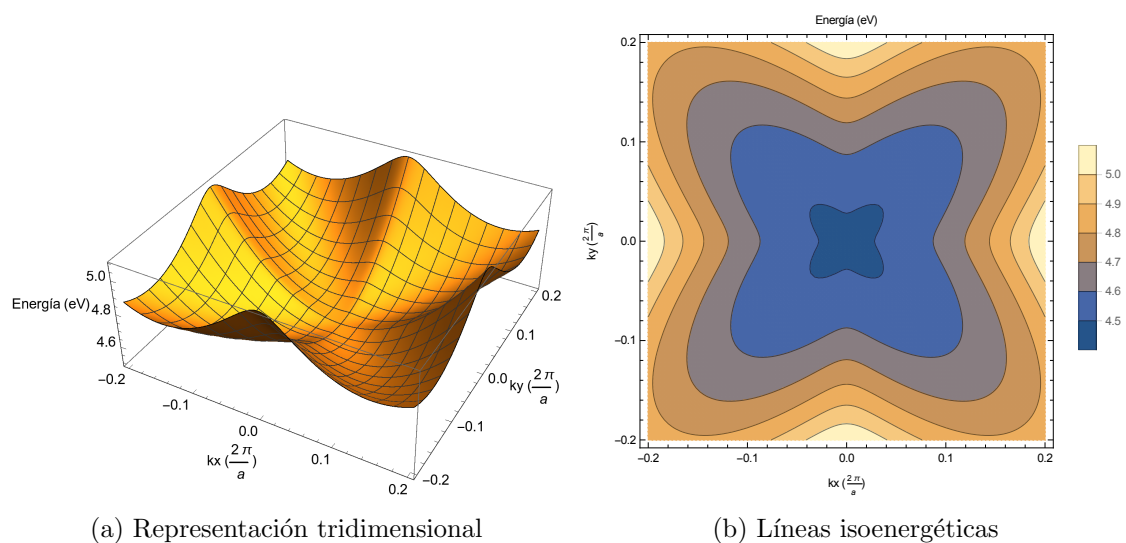


Figura 4.24: Primera banda tipo p^c para $H_{7 \times 7}$

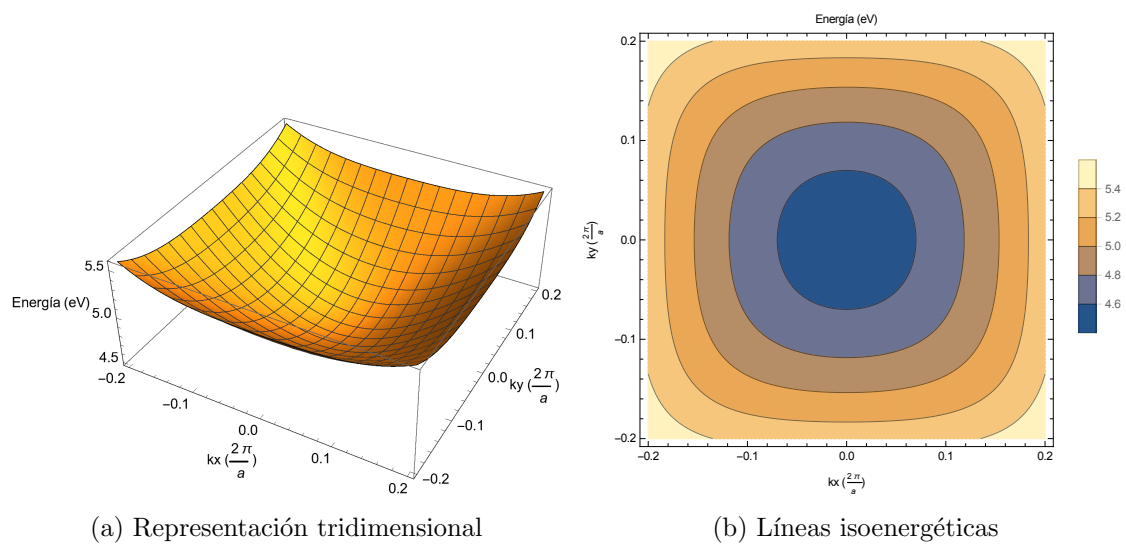


Figura 4.25: Segunda banda tipo p^c para $H_{7 \times 7}$

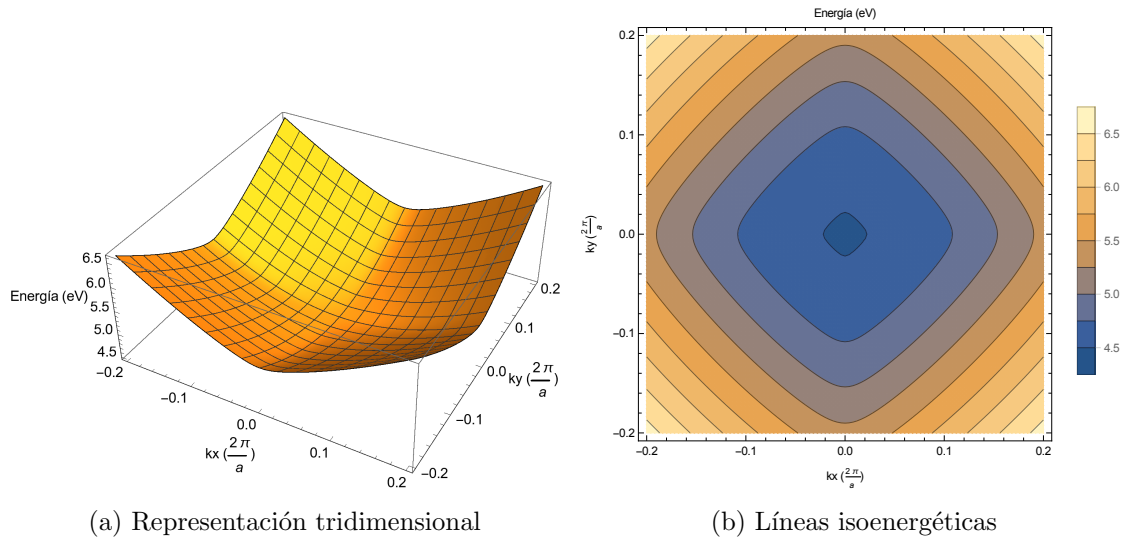


Figura 4.26: Tercera banda tipo p^c para $H_{7 \times 7}$

La primera, segunda y cuarta banda son bastante esféricas, la sexta banda también puede considerarse esférica para valores de k pequeños mientras que la tercera y séptima presentan forma de estrella y cuadrada respectivamente.

■ Hamiltoniano $H_{8 \times 8}$

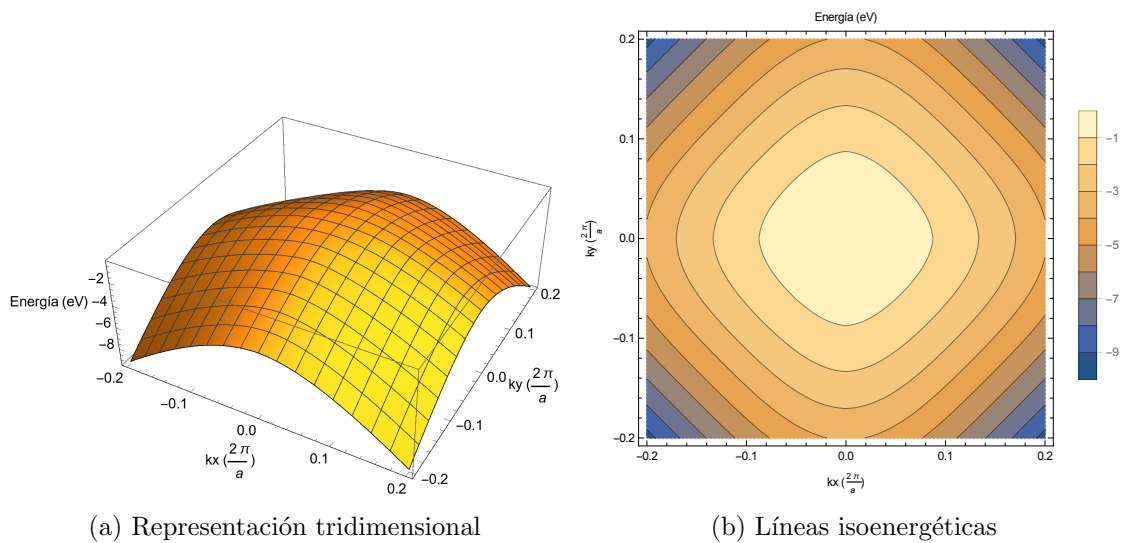


Figura 4.27: Primera banda tipo ${}^2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8}$

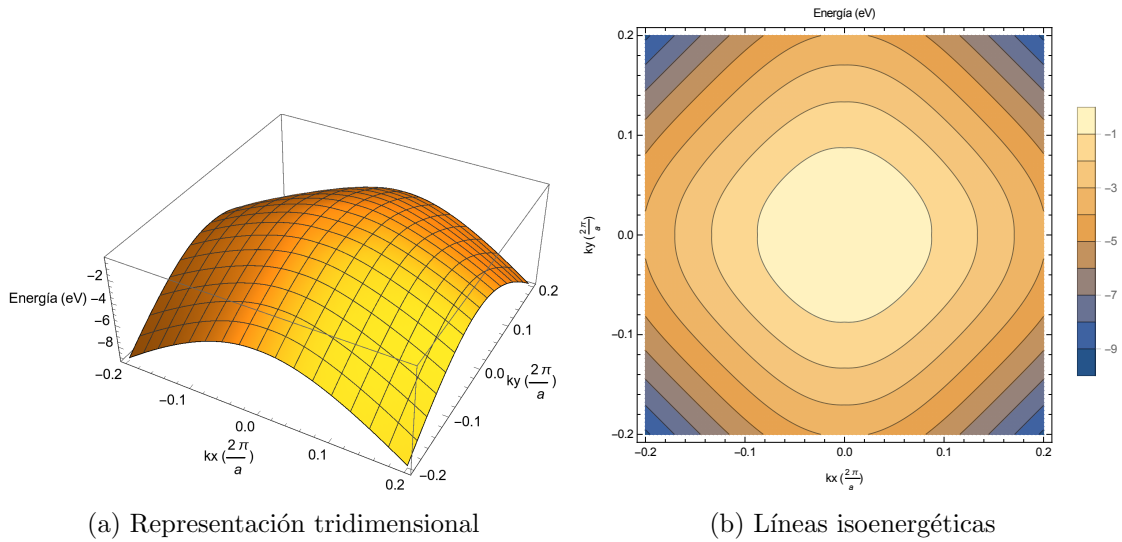


Figura 4.28: Segunda banda tipo $2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8}$

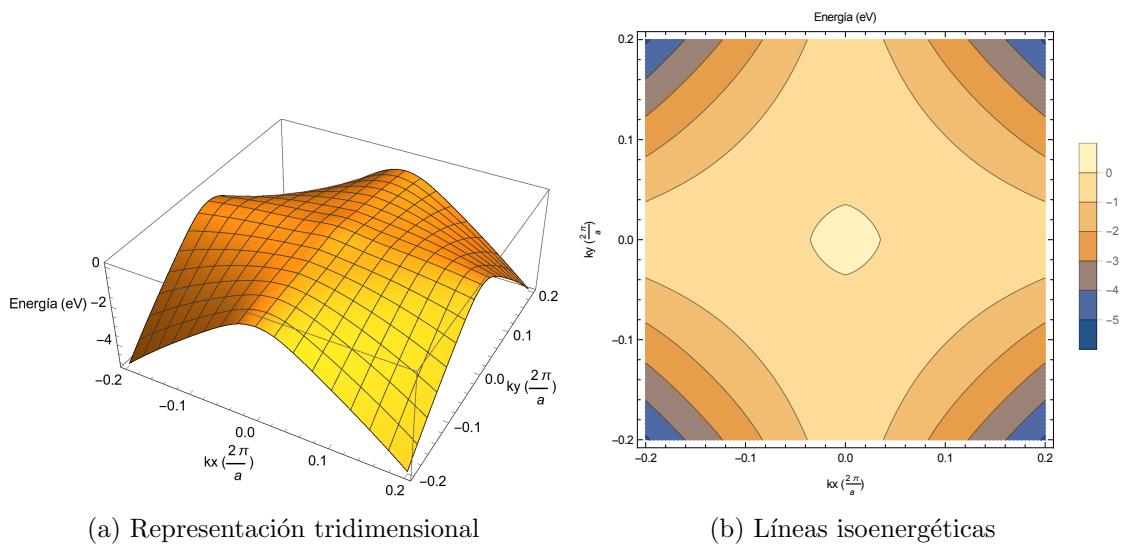


Figura 4.29: Primera banda tipo $2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8}$

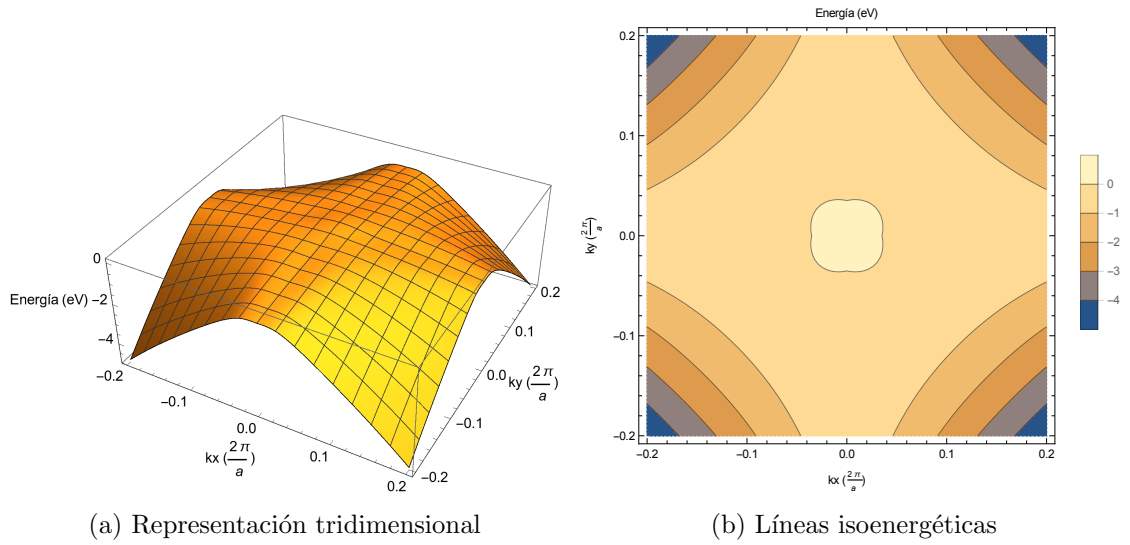


Figura 4.30: Segunda banda tipo ${}^2P_{3/2}^v$ para $H_{8 \times 8}$

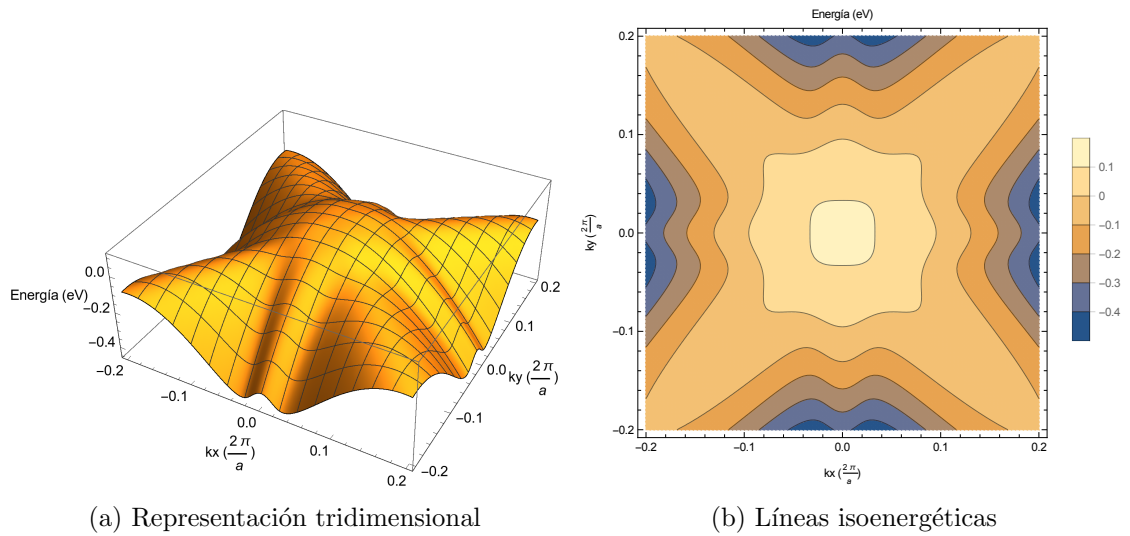
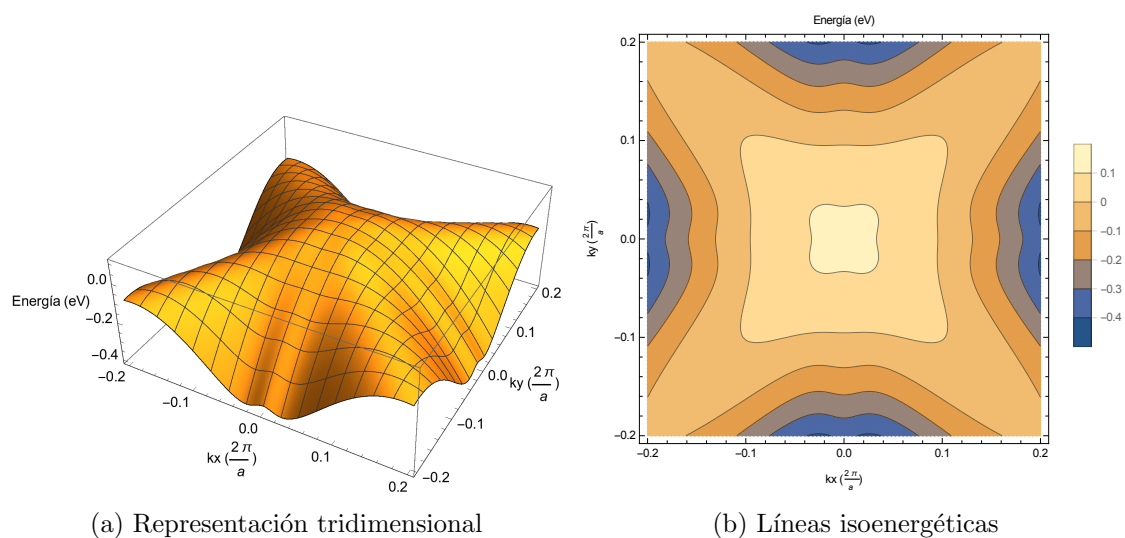
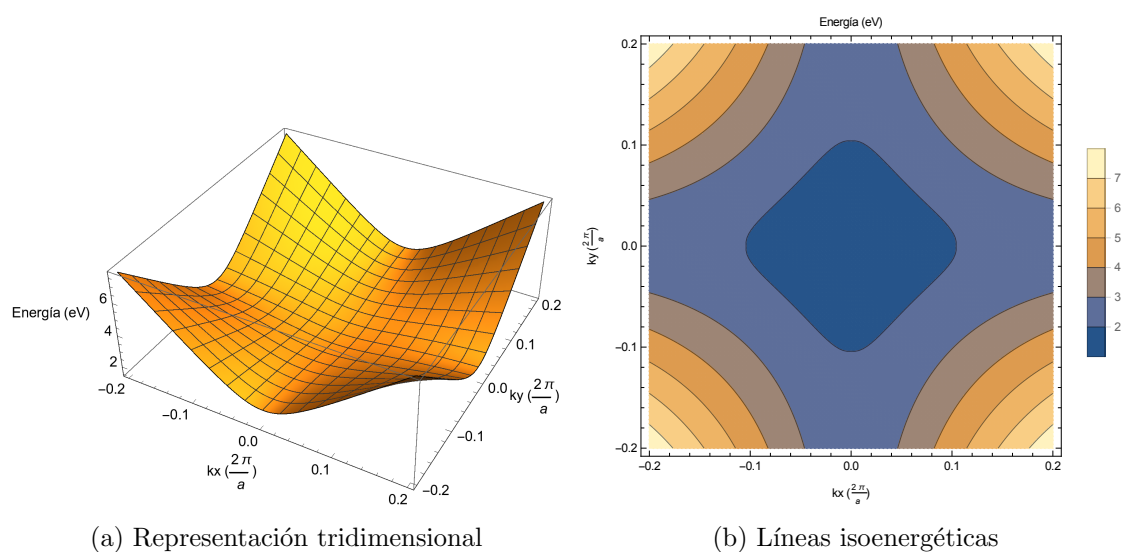


Figura 4.31: Tercera banda tipo ${}^2P_{3/2}^v$ para $H_{8 \times 8}$



(a) Representación tridimensional

(b) Líneas isoenergéticas

Figura 4.32: Cuarta banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8}$ 

(a) Representación tridimensional

(b) Líneas isoenergéticas

Figura 4.33: Primera banda tipo ${}^2S_{\frac{1}{2}}^c$ para $H_{8 \times 8}$

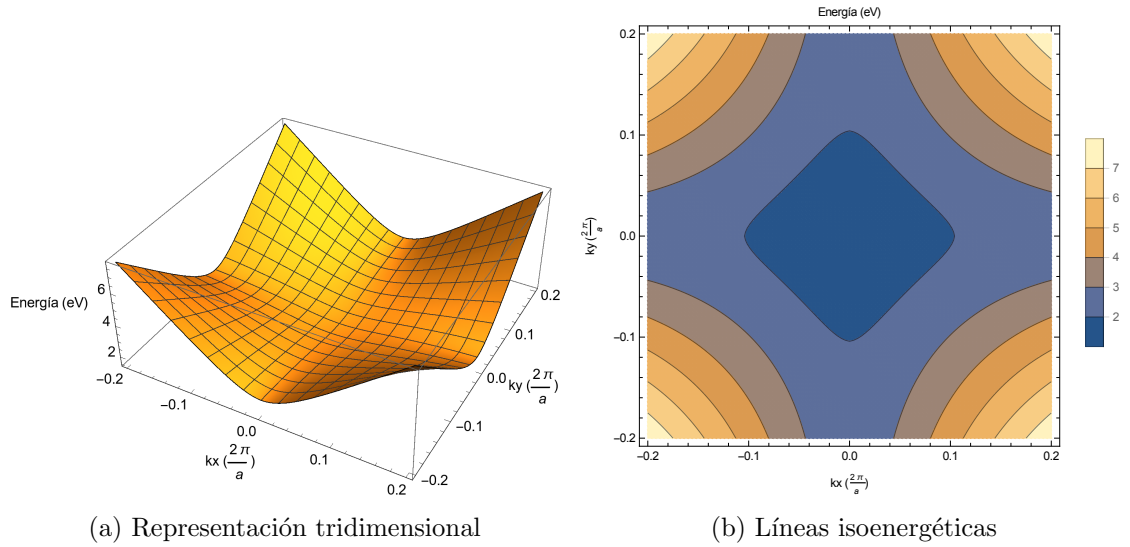


Figura 4.34: Segunda banda tipo $2S_{\frac{1}{2}}^c$ para $H_{8 \times 8}$

Se observa que debido a la interacción espín-órbita las bandas pierden su esfericidad

■ Hamiltoniano $H_{8 \times 8(kpi)}$

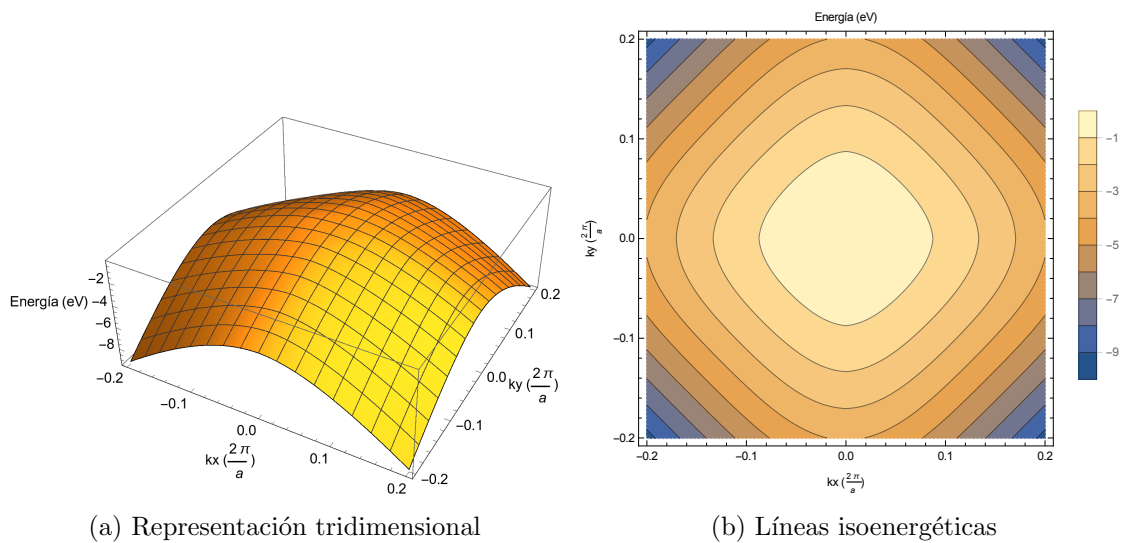


Figura 4.35: Primera banda tipo $2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8(kpi)}$

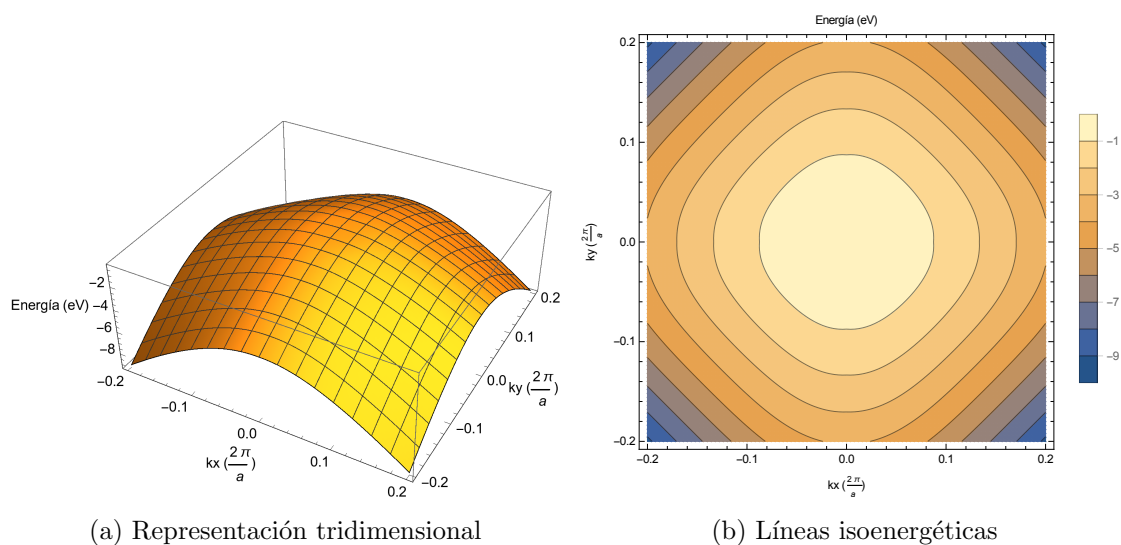


Figura 4.36: Segunda banda tipo $2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8}(k\pi i)$

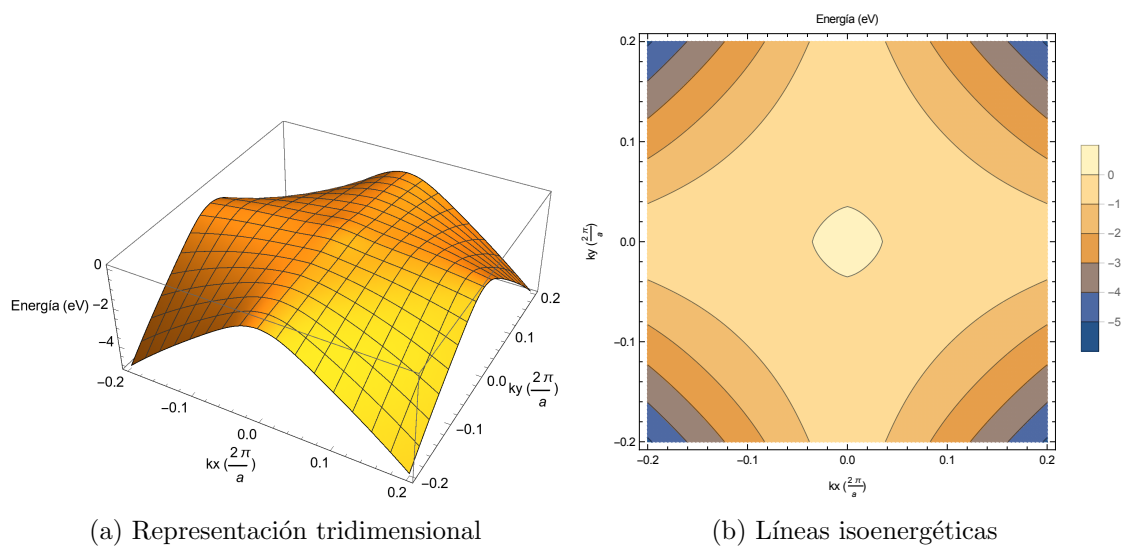


Figura 4.37: Primera banda tipo $2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{8 \times 8}(k\pi i)$

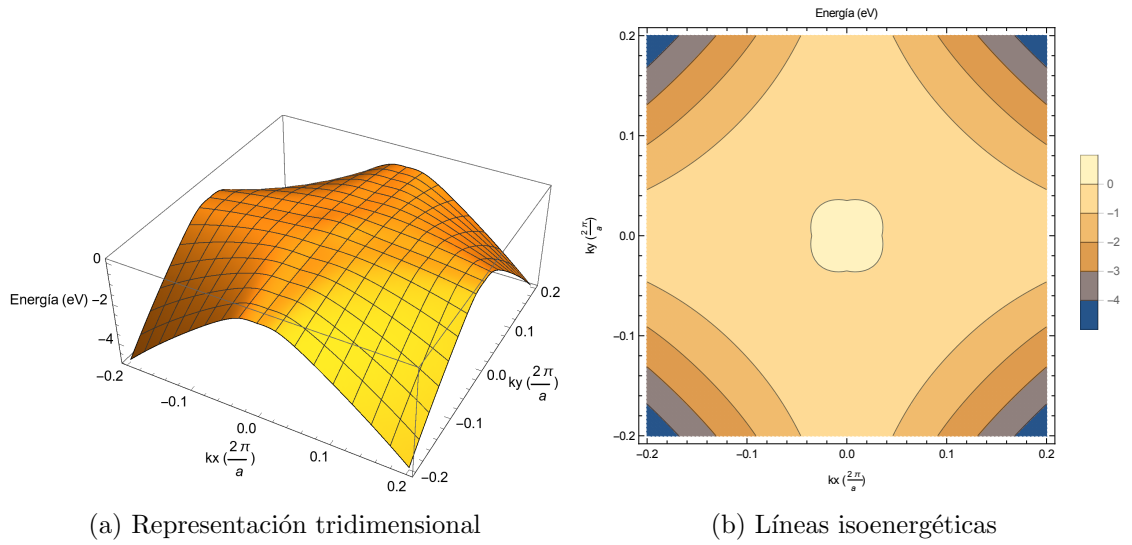


Figura 4.38: Segunda banda tipo ${}^2P_{3/2}^v$ para $H_{8 \times 8(k\pi)}$

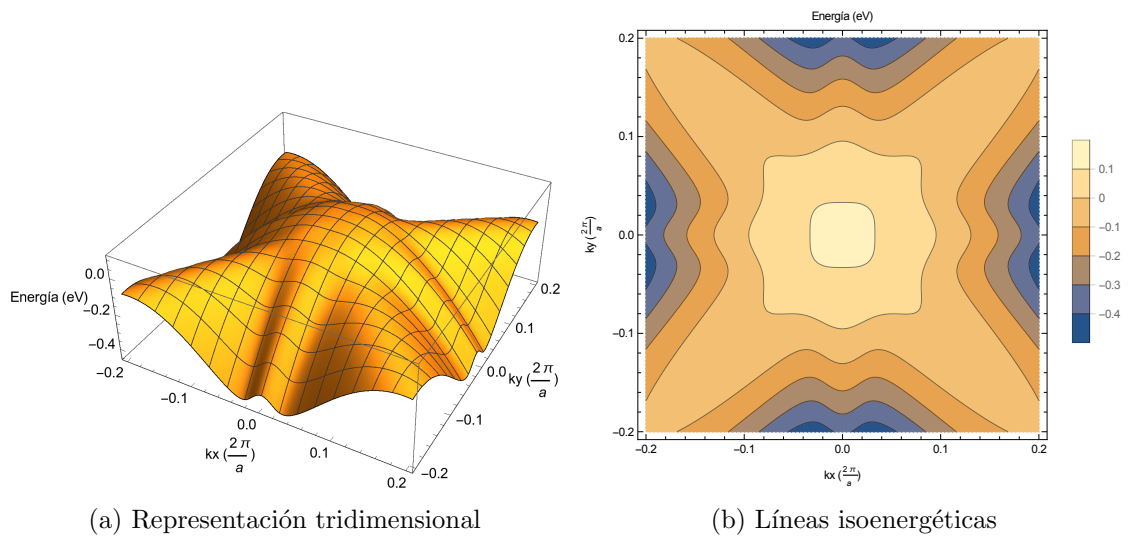
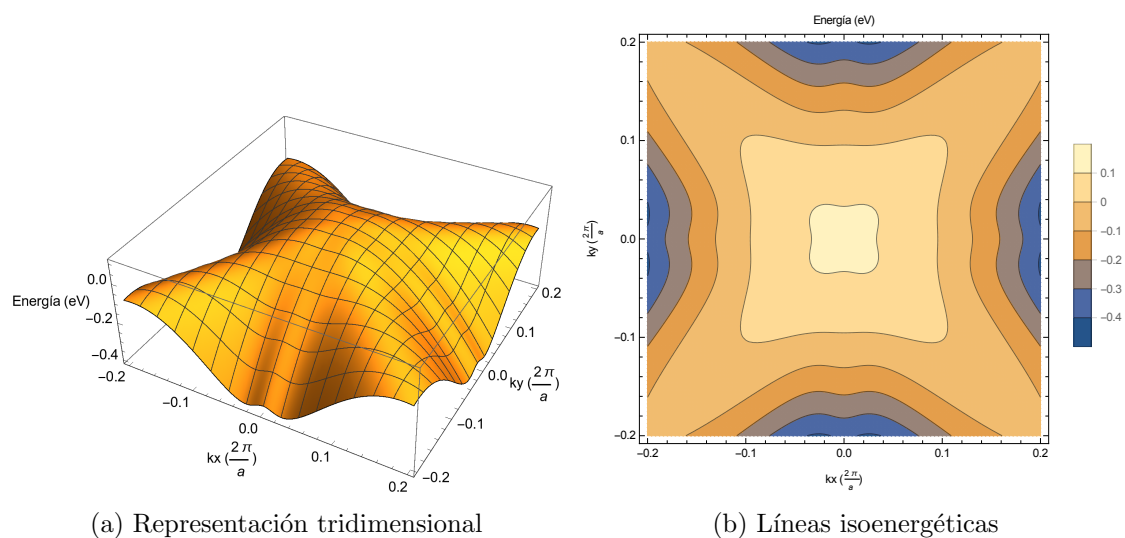
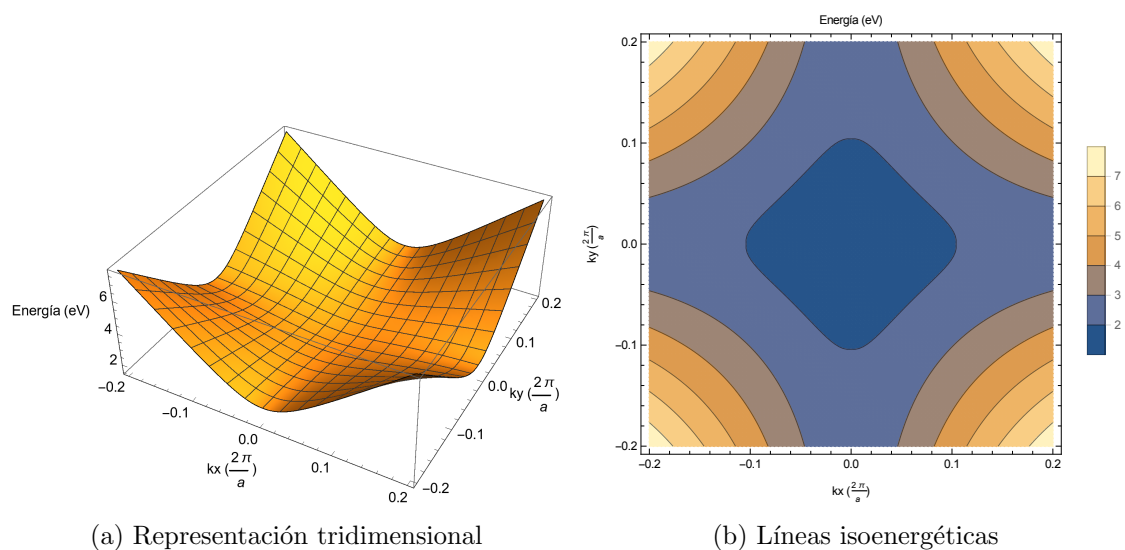


Figura 4.39: Tercera banda tipo ${}^2P_{3/2}^v$ para $H_{8 \times 8(k\pi)}$



(a) Representación tridimensional

(b) Líneas isoenergéticas

Figura 4.40: Cuarta banda tipo ${}^2P_{3/2}^v$ para $H_{8 \times 8(k\pi)}$ 

(a) Representación tridimensional

(b) Líneas isoenergéticas

Figura 4.41: Primera banda tipo ${}^2S_{1/2}^c$ para $H_{8 \times 8(k\pi)}$

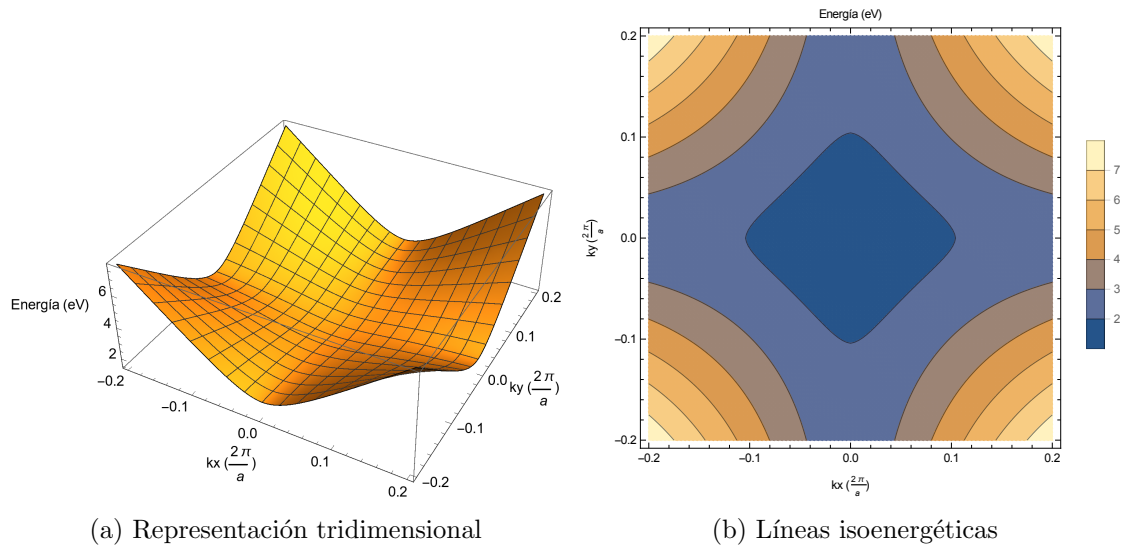


Figura 4.42: Segunda banda tipo ${}^2S_{\frac{1}{2}}^c$ para $H_{8 \times 8(k\pi)}$

La forma de las bandas que se obtiene es muy similar a la que se obtiene a partir de $H_{8 \times 8}$.

■ Hamiltoniano $H_{14 \times 14}$

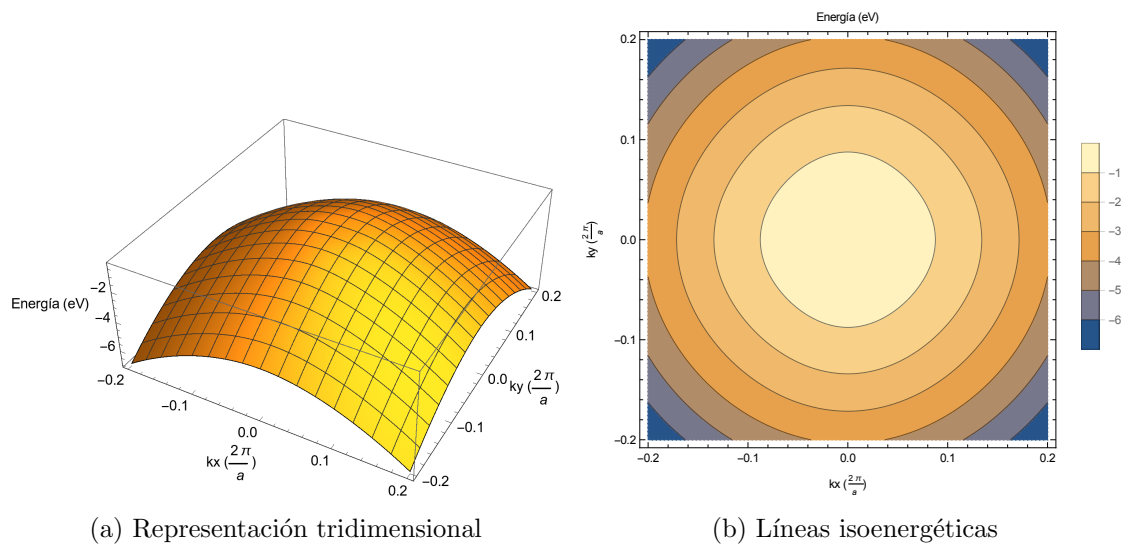


Figura 4.43: Primera banda tipo ${}^2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

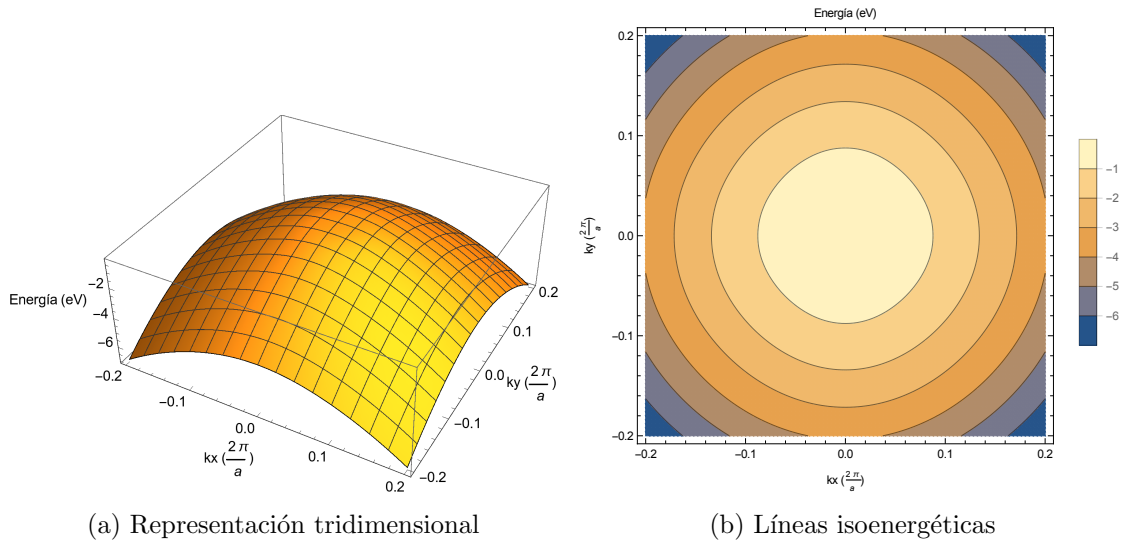


Figura 4.44: Segunda banda tipo ${}^2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

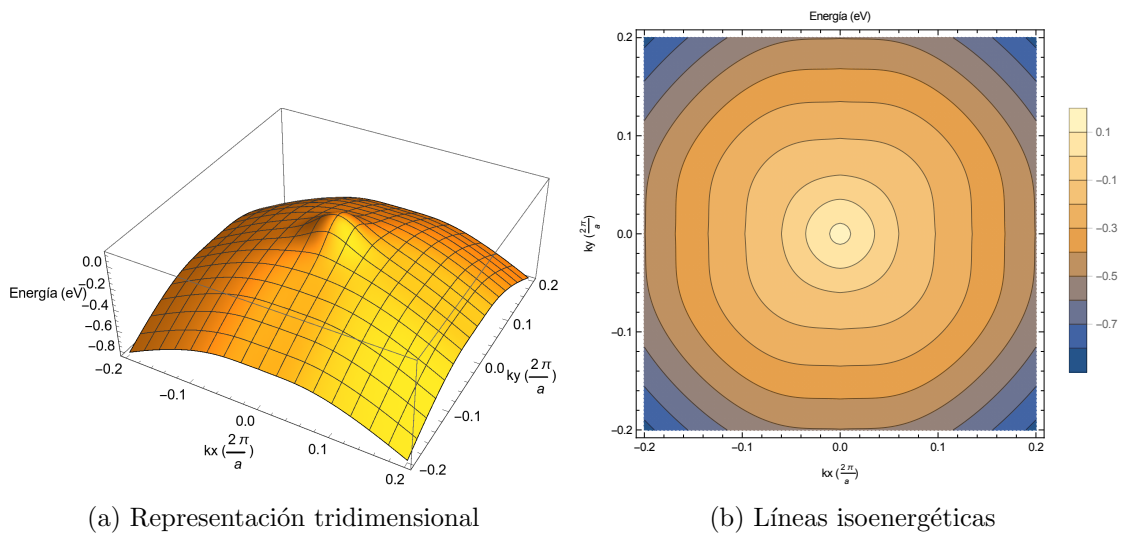


Figura 4.45: Primera banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

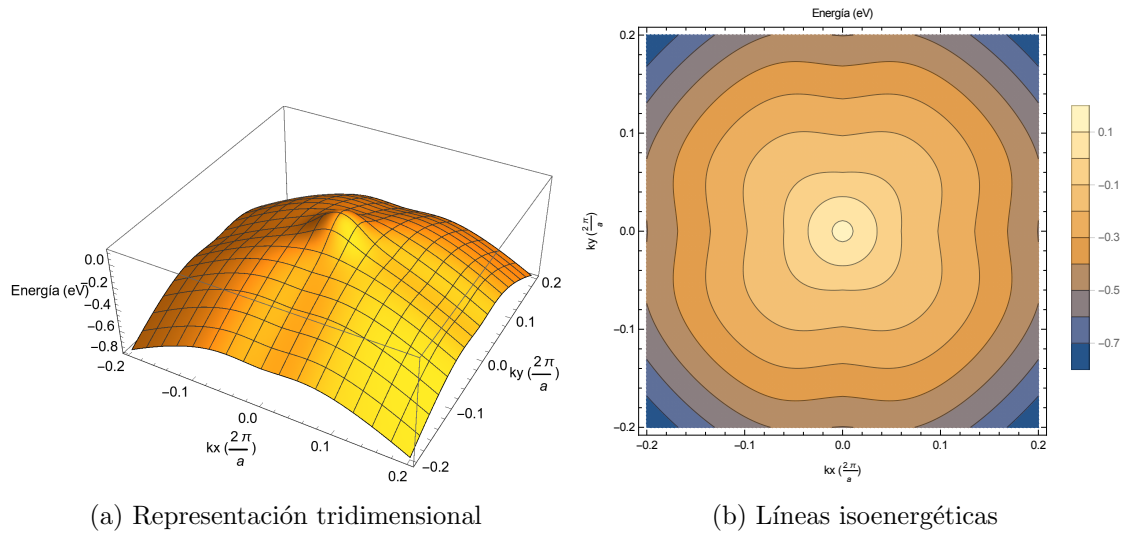


Figura 4.46: Segunda banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

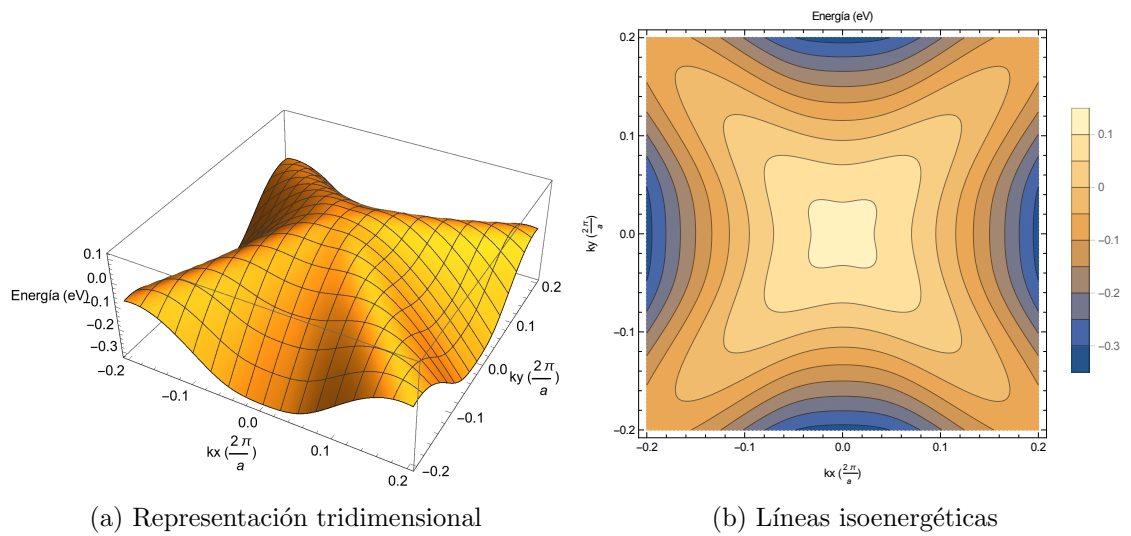


Figura 4.47: Tercera banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

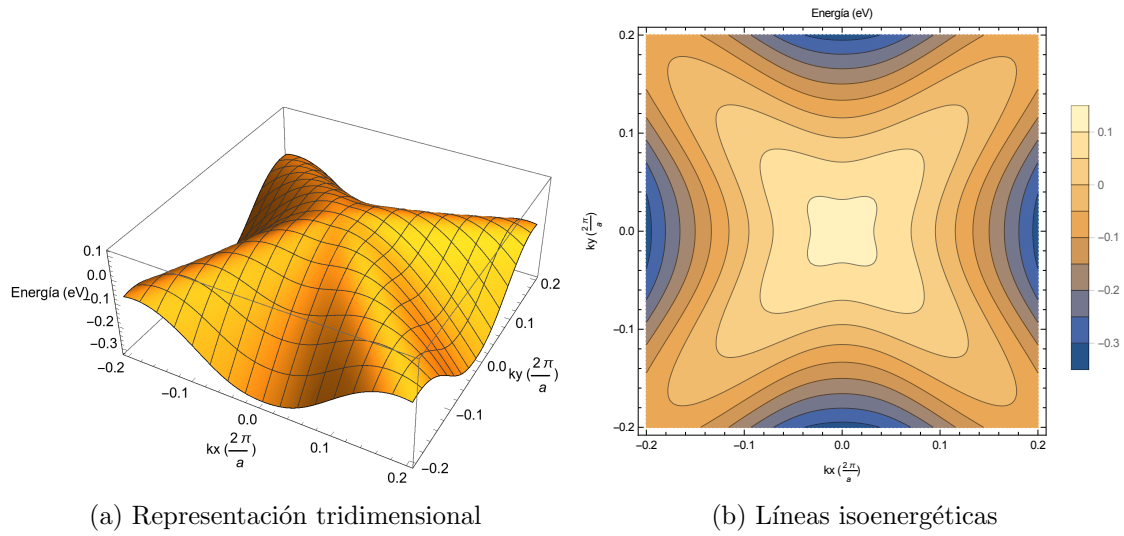


Figura 4.48: Cuarta banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

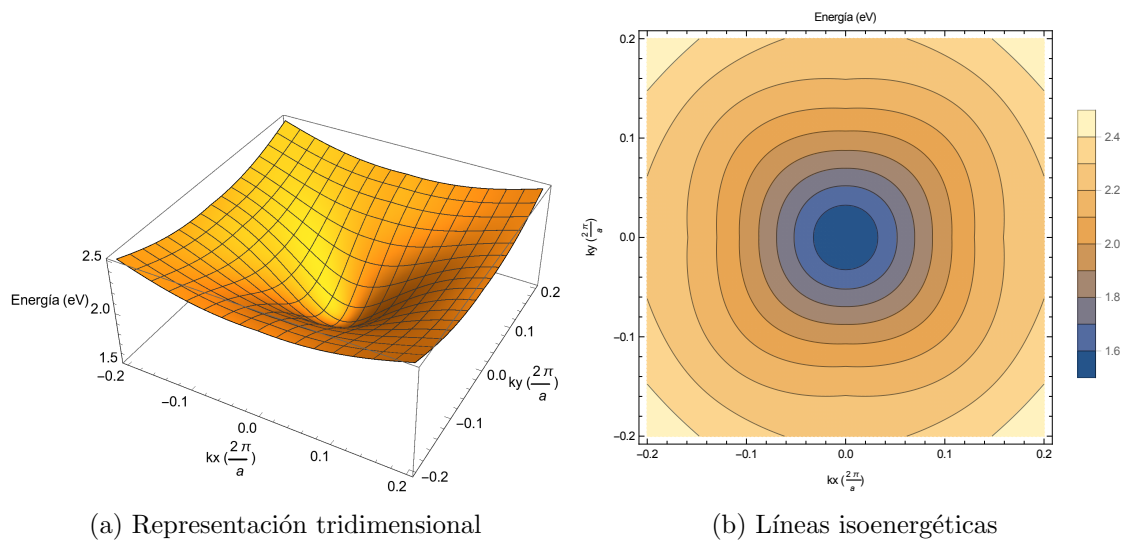


Figura 4.49: Primera banda tipo ${}^2S_{\frac{1}{2}}^c$ para $H_{14 \times 14}$

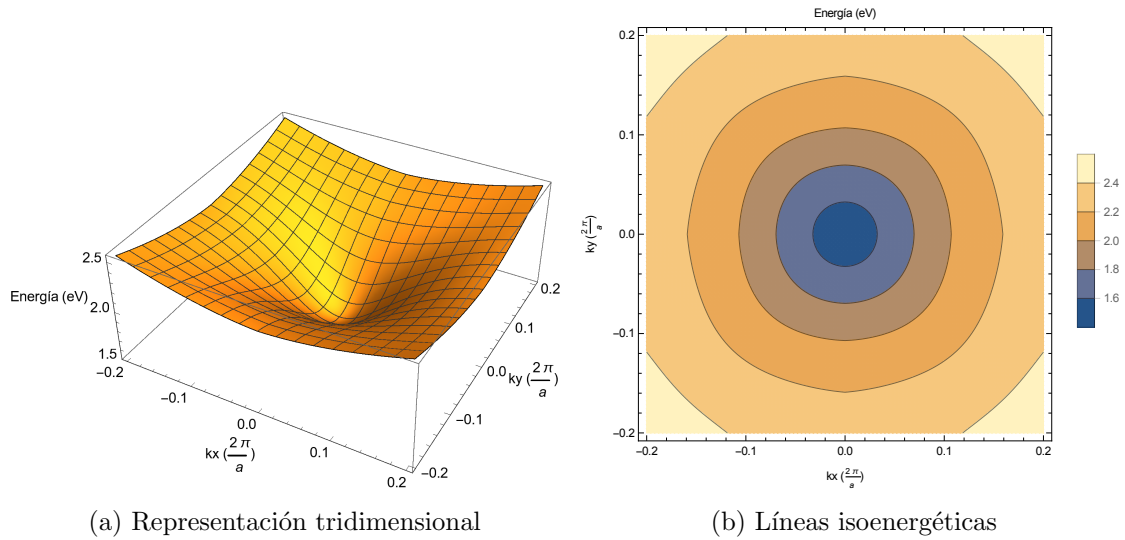


Figura 4.50: Segunda banda tipo ${}^2S_{\frac{1}{2}}^c$ para $H_{14 \times 14}$

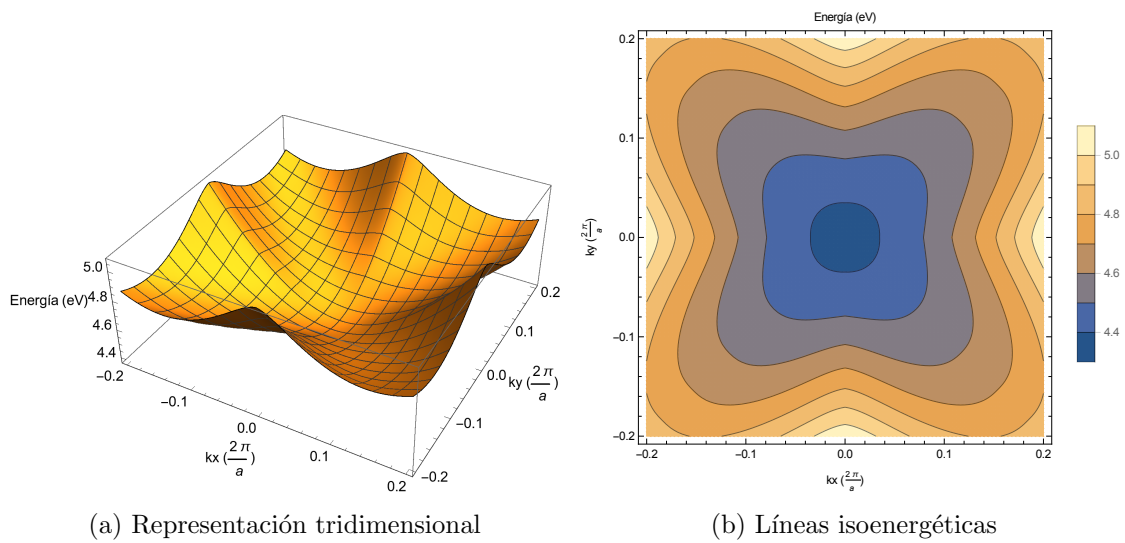


Figura 4.51: Primera banda tipo ${}^2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

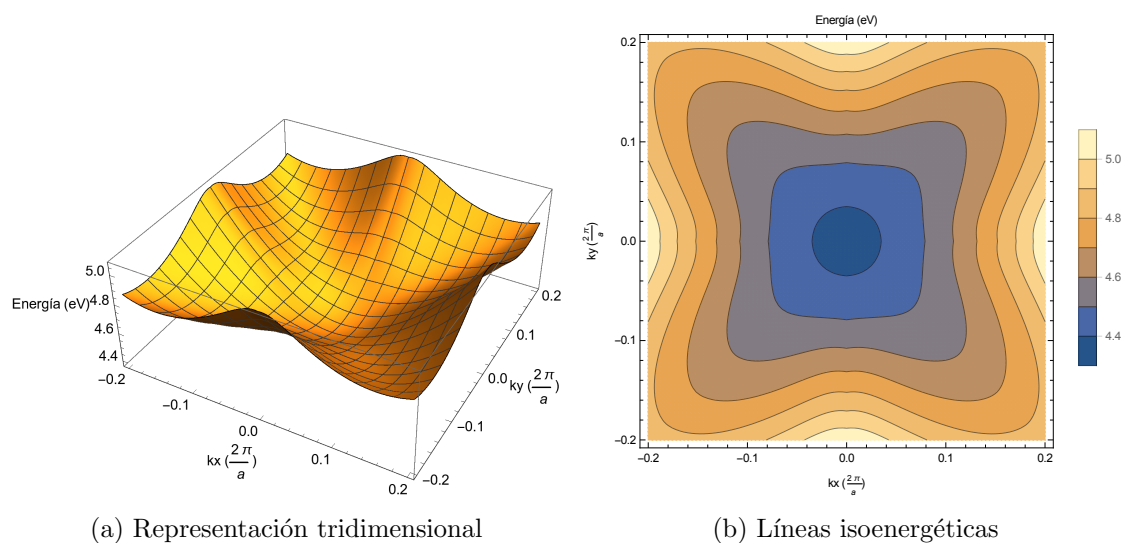


Figura 4.52: Segunda banda tipo ${}^2P_{\frac{1}{2}}^v$ para $H_{14 \times 14}$

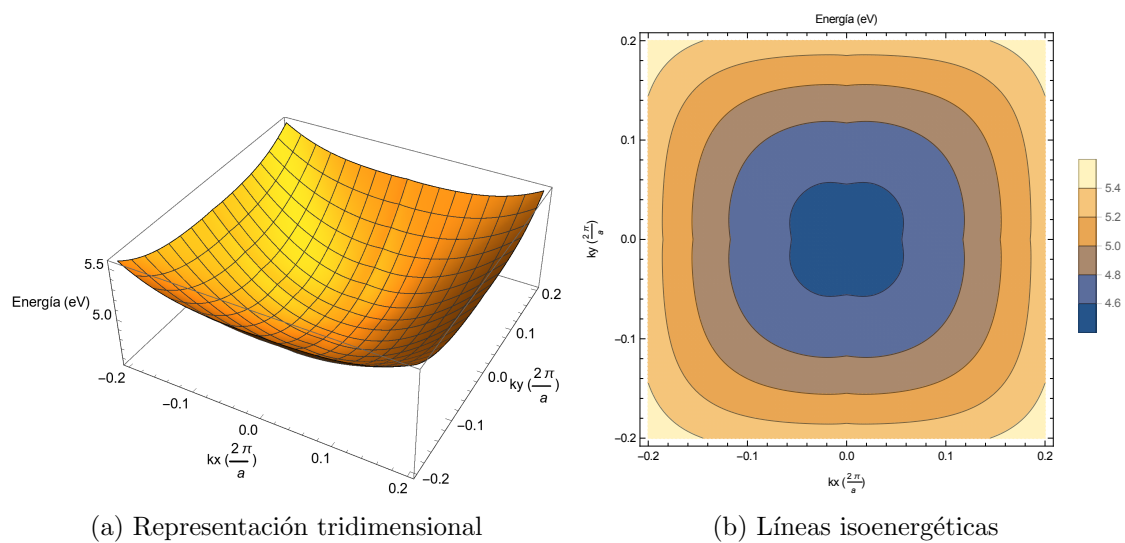


Figura 4.53: Primera banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^c$ para $H_{14 \times 14}$

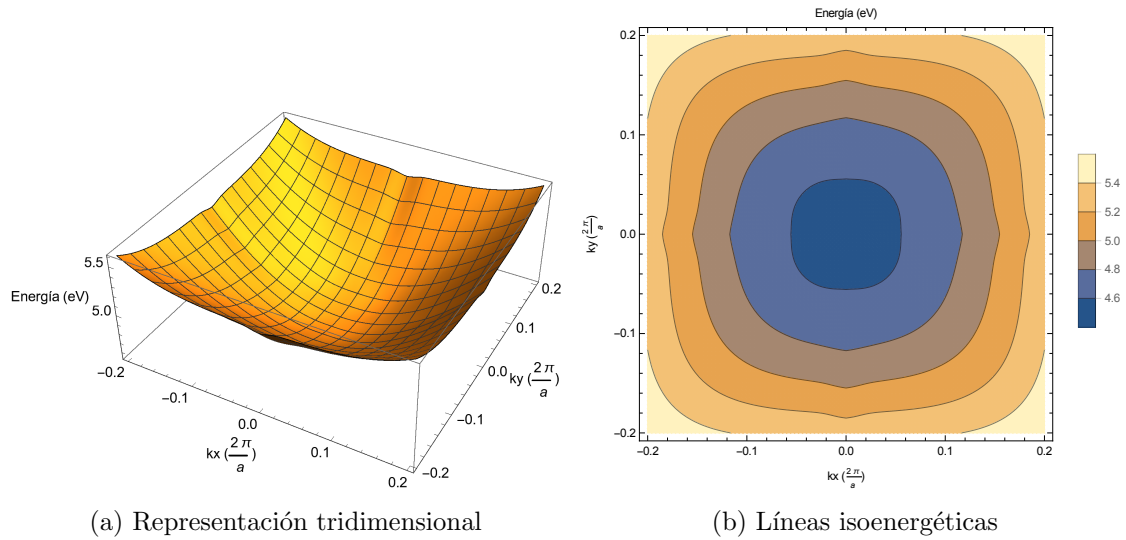


Figura 4.54: Segunda banda tipo ${}^2P_{3/2}^c$ para $H_{14 \times 14}$

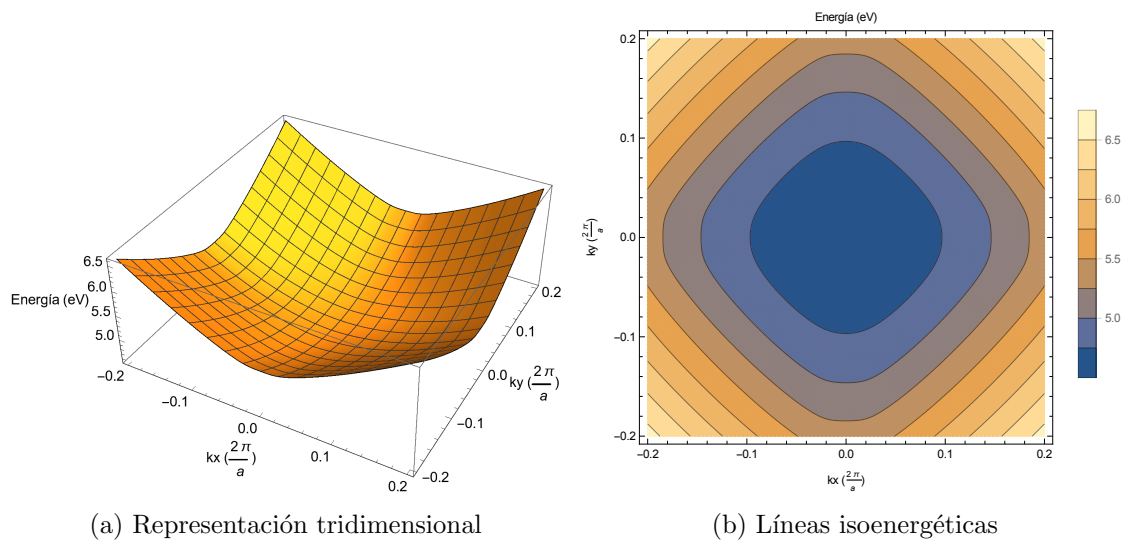


Figura 4.55: Tercera banda tipo ${}^2P_{3/2}^c$ para $H_{14 \times 14}$

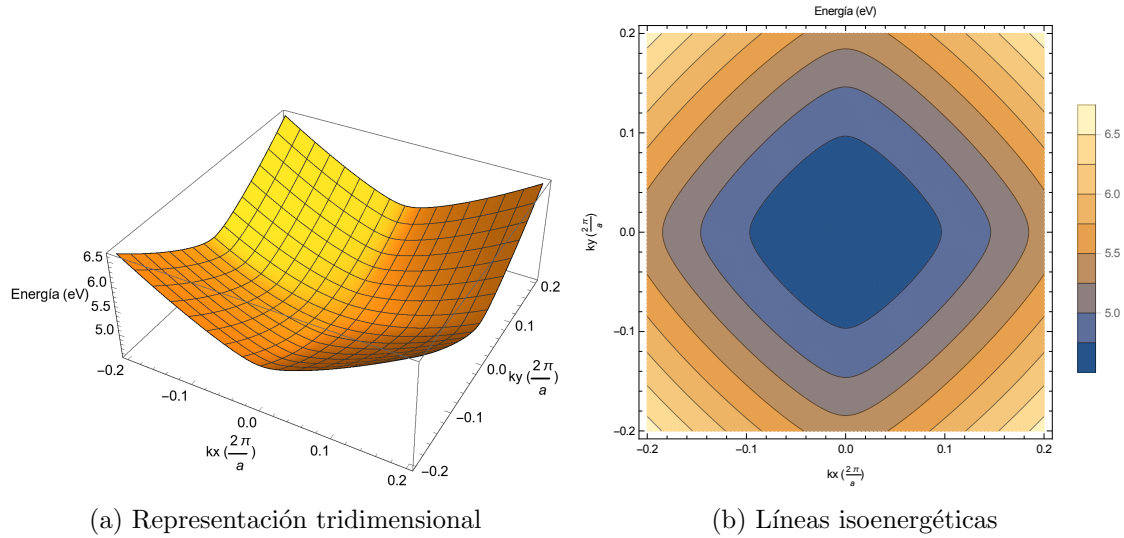


Figura 4.56: Cuarta banda tipo ${}^2P_{\frac{3}{2}}^c$ para $H_{14 \times 14}$

Las bandas primera, segunda, tercera, cuarta, séptima y octava presentan una forma más esférica que en el caso $H_{8 \times 8}$.

4.3. Masas efectivas

4.3.1. Cálculo analítico

Sustituyendo los valores de los parámetros en las expresiones obtenidas por el método de perturbaciones de Löwdin se obtienen los valores de las masas efectivas

$$\text{Masa de electrones: } 0,05554 m_0 \quad (4.1)$$

$$\text{Huecos ligeros: } -0,0277 m_0 \quad (4.2)$$

$$\text{Huecos pesados: } -0,2083 m_0 \quad (4.3)$$

4.3.2. Cálculos numéricos en el punto Γ

Mediante cálculos numéricos con el ordenador se obtienen los valores de masas efectivas para cada banda de energía en el punto Γ para cada uno de los hamiltonianos considerados.

- Hamiltoniano $H_{4 \times 4}$:

Banda	$m^* (m_0)$
s^c	0.0557
p_1^v	-0.0292
p_3^v	-0.3783
p_2^v	-0.3783

Cuadro 4.1: Masas efectivas en el punto Γ para $H_{4 \times 4}$

- Hamiltoniano $H_{7 \times 7}$:

Banda	$m^* (m_0)$
p_1^v	-0.0292
p_3^v	-0.3783
p_2^v	-0.3783
s^c	0.0557
p_1^c	0.332
p_3^c	0.205
p_2^c	0.205

Cuadro 4.2: Masas efectivas en el punto Γ para $H_{7 \times 7}$

- Hamiltoniano $H_{8 \times 8}$:

Banda	$m^* (m_0)$
$p_1^v \uparrow$	-0.0811
$p_1^v \downarrow$	-0.0811
$p_2^v \uparrow$	-0.0405
$p_2^v \downarrow$	-0.0405
$p_3^v \uparrow$	-0.378
$p_3^v \downarrow$	-0.378
$s^c \uparrow$	0.0551
$s^c \downarrow$	0.0551

Cuadro 4.3: Masas efectivas en el punto Γ para $H_{8 \times 8}$

- Hamiltoniano $H_{8 \times 8(k\pi)}$:

Banda	$m^* (m_0)$
$p_1^v \uparrow$	-0.0811
$p_1^v \downarrow$	-0.0811
$p_2^v \uparrow$	-0.0404
$p_2^v \downarrow$	-0.0404
$p_3^v \uparrow$	-0.378
$p_3^v \downarrow$	-0.378
$s^c \uparrow$	0.0551
$s^c \downarrow$	0.0551

Cuadro 4.4: Masas efectivas en el punto Γ para $H_{8 \times 8(k\pi)}$

- Hamiltoniano $H_{14 \times 14}$:

Banda	$m^* (m_0)$
$p_1^v \uparrow$	-0.0794
$p_1^v \downarrow$	-0.0794
$p_2^v \uparrow$	-0.0414
$p_2^v \downarrow$	-0.0414
$p_3^v \uparrow$	-0.357
$p_3^v \downarrow$	-0.357
$s^c \uparrow$	0.0555
$s^c \downarrow$	0.0555
$p_1^c \uparrow$	0.223
$p_1^c \downarrow$	0.223
$p_2^c \uparrow$	0.280
$p_2^c \downarrow$	0.280
$p_3^c \uparrow$	0.211
$p_3^c \downarrow$	0.211

Cuadro 4.5: Masas efectivas en el punto Γ para $H_{14 \times 14}$

4.3.3. Estudio de la dependencia de la masa con \vec{k}

Haciendo variar el valor de k para los distintos ejes se obtiene una representación gráfica de la dependencia del tensor de masa efectiva con k para cada una de las bandas de los distintos hamiltonianos considerados

■ $H_{4 \times 4}$

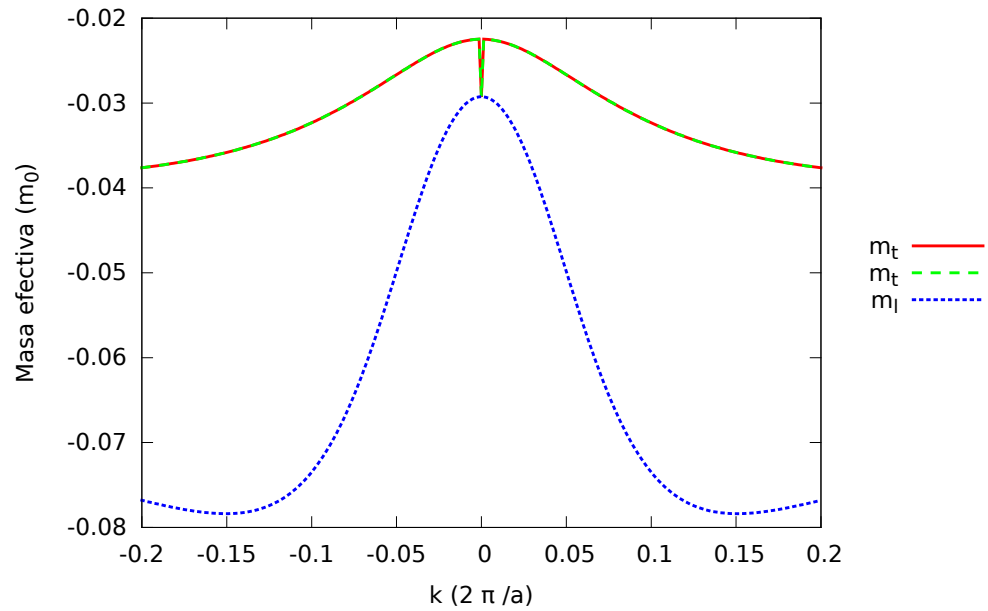


Figura 4.57: $H_{4 \times 4}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 1

Se observa una fuerte dependencia k de las componentes del tensor de masa efectiva.

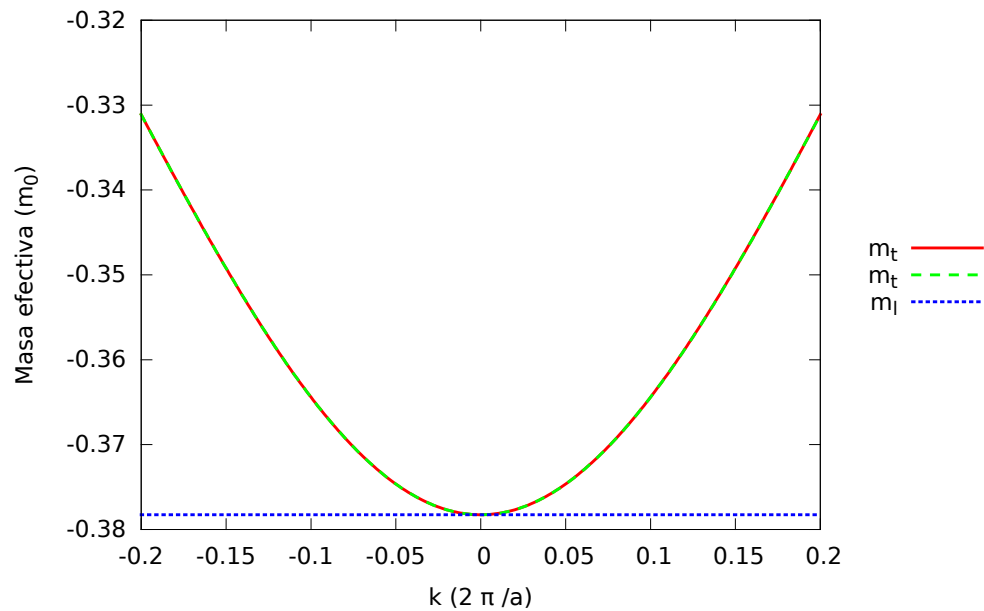


Figura 4.58: $H_{4 \times 4}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 2

En esta figura se observa que la componente longitudinal es constante y por lo tanto se puede expresar la energía de la banda en la forma:

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_l^2}{m_l} + f(k_t, m_t) \right] \quad (4.4)$$

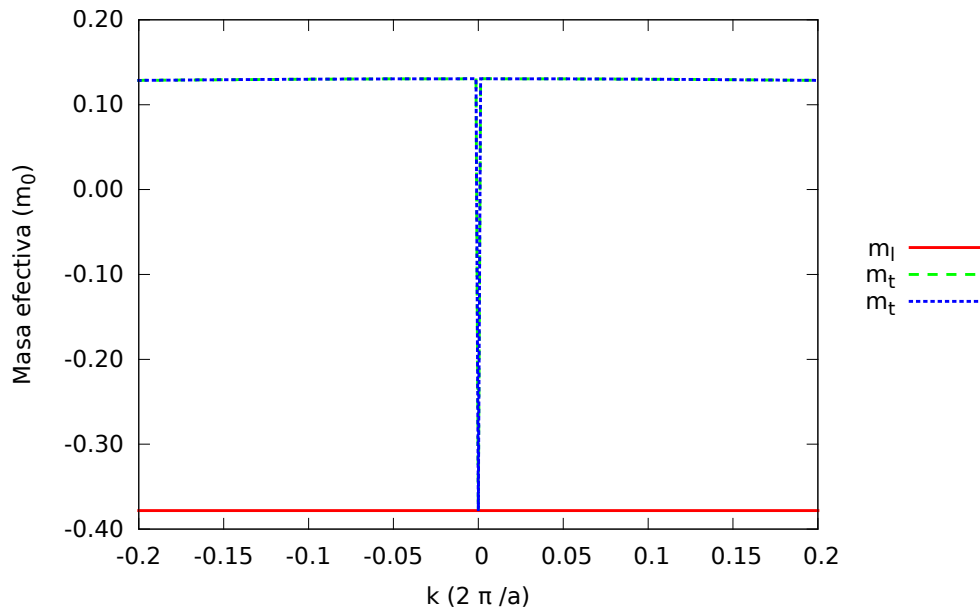


Figura 4.59: $H_{4 \times 4}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 3

En esta figura se observa que las tres componentes son constantes y por lo tanto se puede expresar la energía de la banda en la forma:

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_l^2}{m_l} + \frac{k_t^2}{m_t} + \frac{k_t^2}{m_t} \right] \quad (4.5)$$

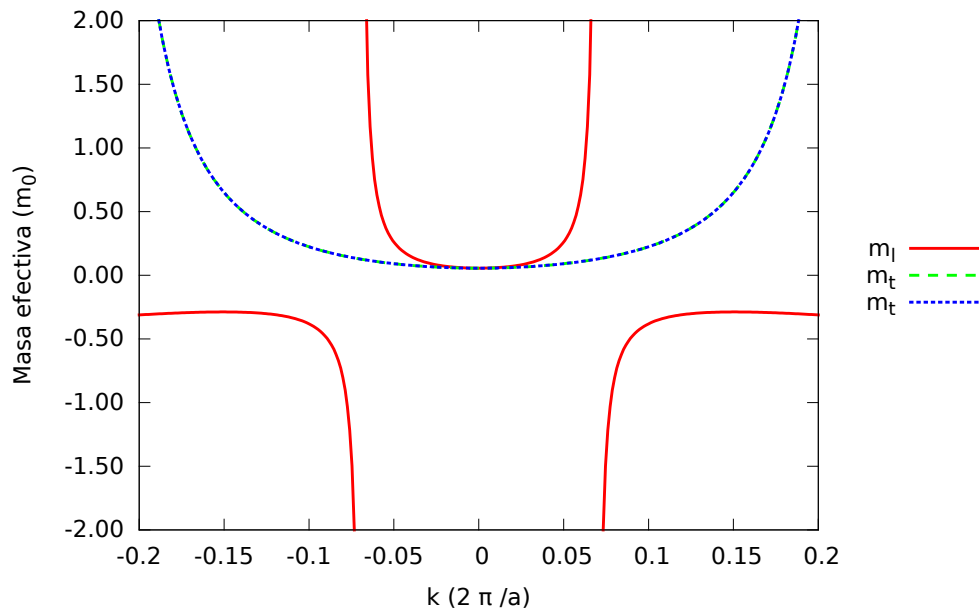


Figura 4.60: $H_{4 \times 4}$ eje Δ $\vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 4

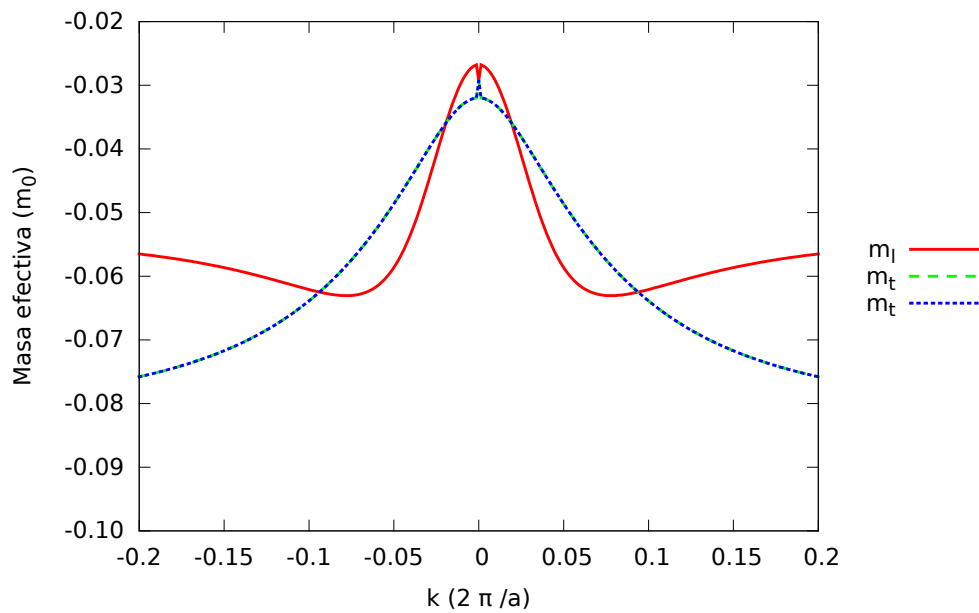


Figura 4.61: $H_{4 \times 4}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 1

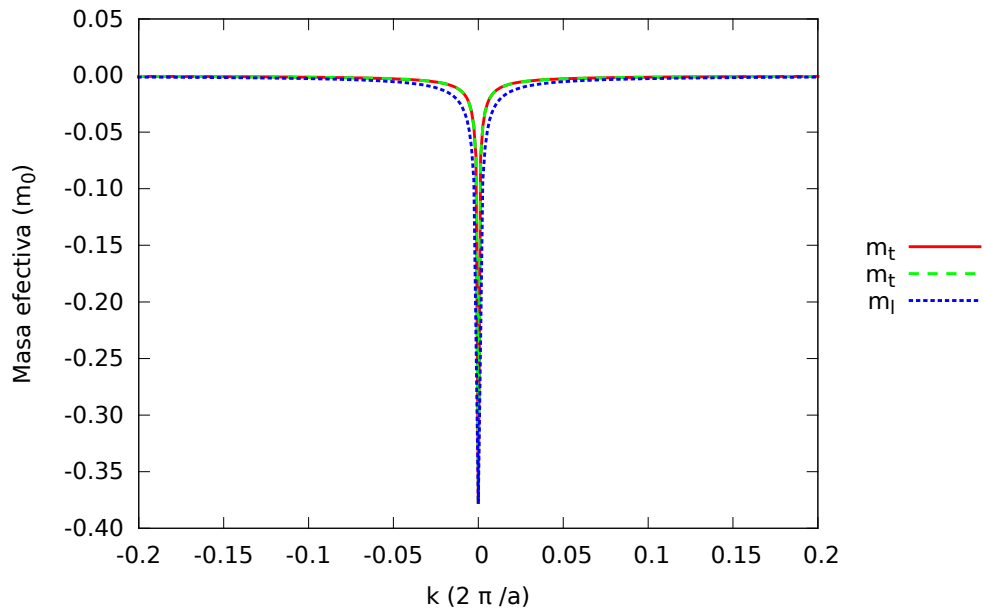


Figura 4.62: $H_{4 \times 4}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 2

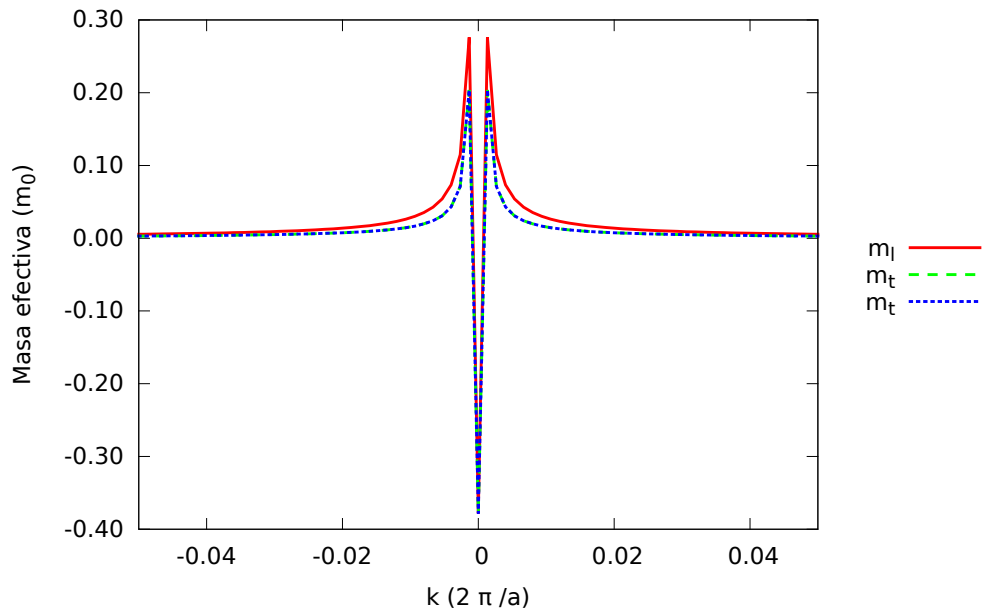


Figura 4.63: $H_{4 \times 4}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 3

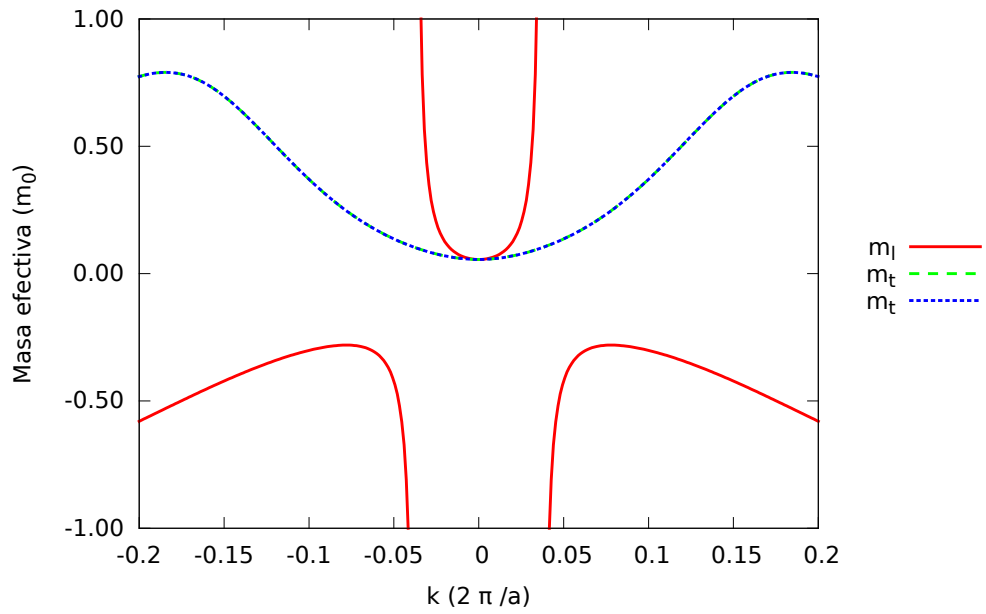


Figura 4.64: $H_{4 \times 4}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 4

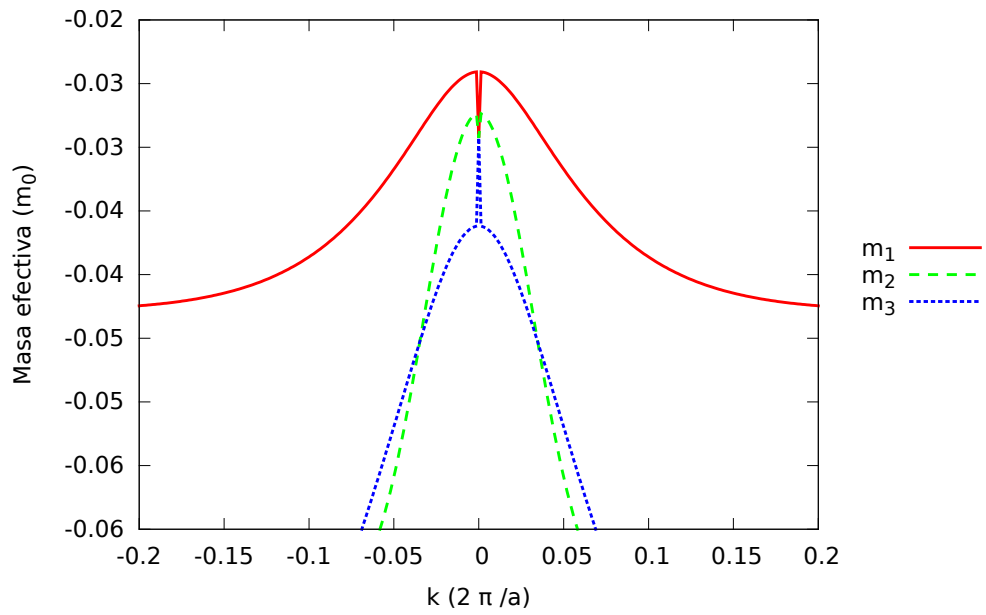


Figura 4.65: $H_{4 \times 4}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 1

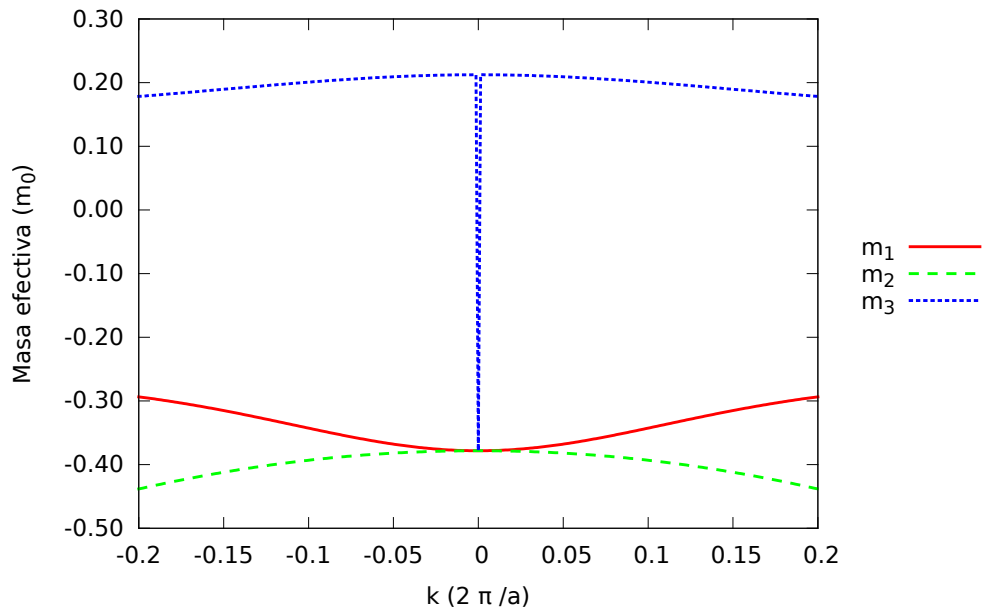


Figura 4.66: $H_{4 \times 4}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 2

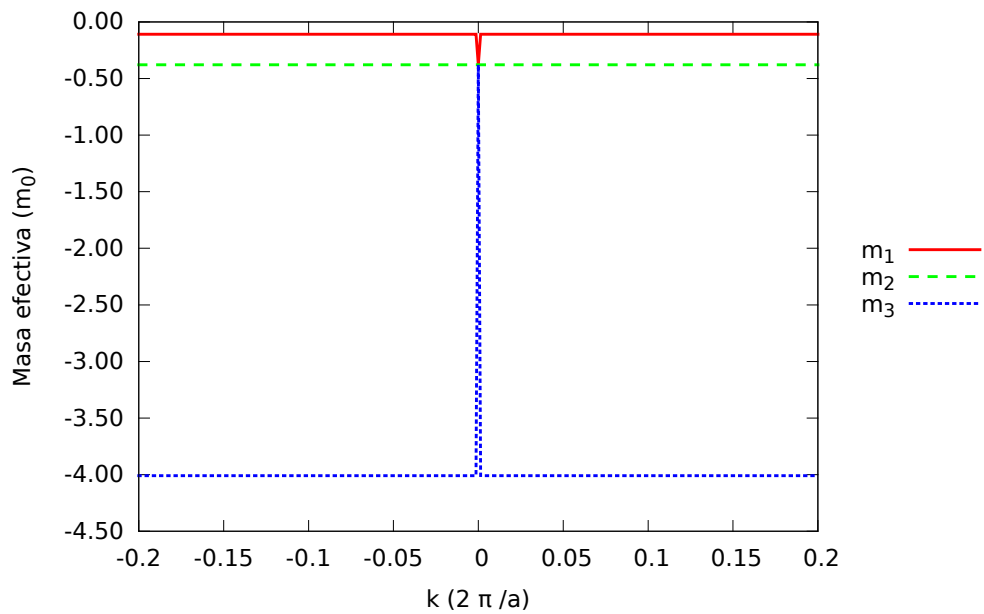


Figura 4.67: $H_{4 \times 4}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 3

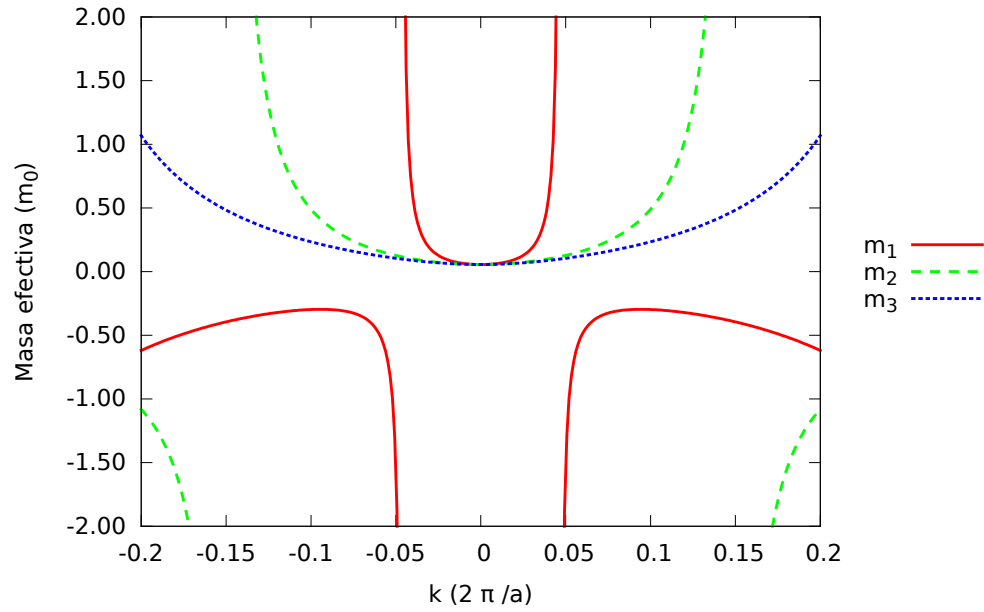


Figura 4.68: $H_{4 \times 4}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 4

■ $H_{7 \times 7}$

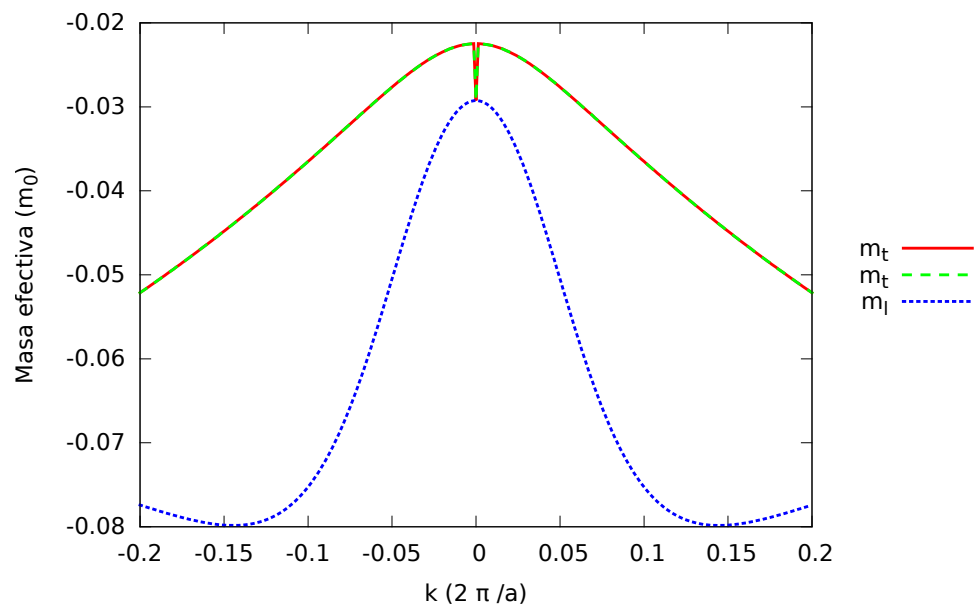


Figura 4.69: $H_{7 \times 7}$ eje Δ $\vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 1

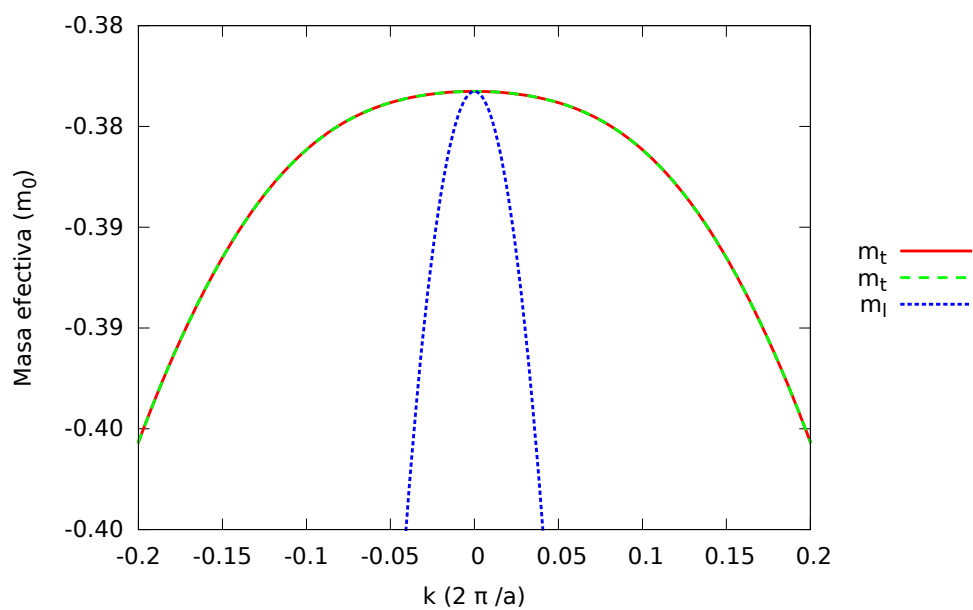


Figura 4.70: $H_{7 \times 7}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 2

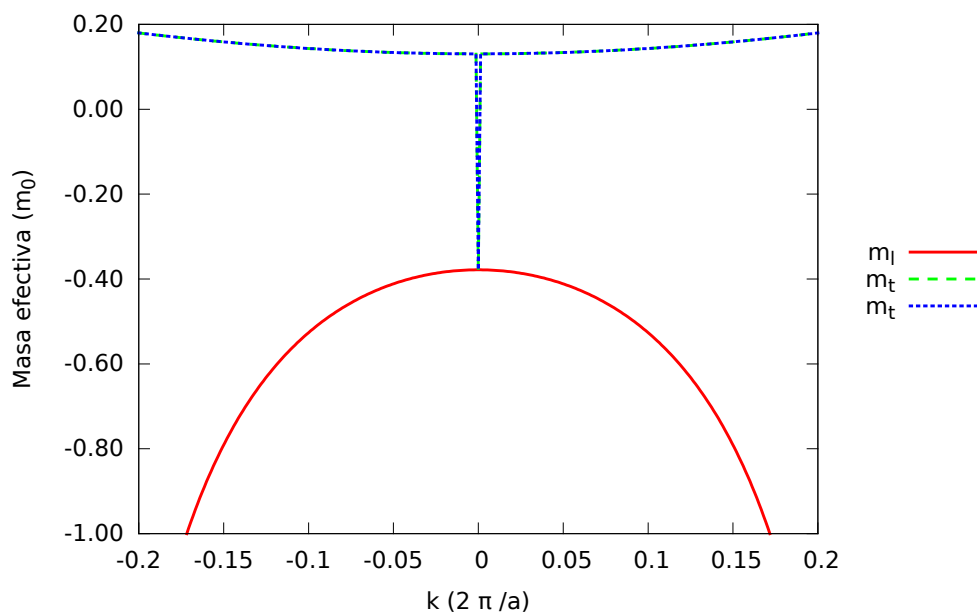


Figura 4.71: $H_{7 \times 7}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 3

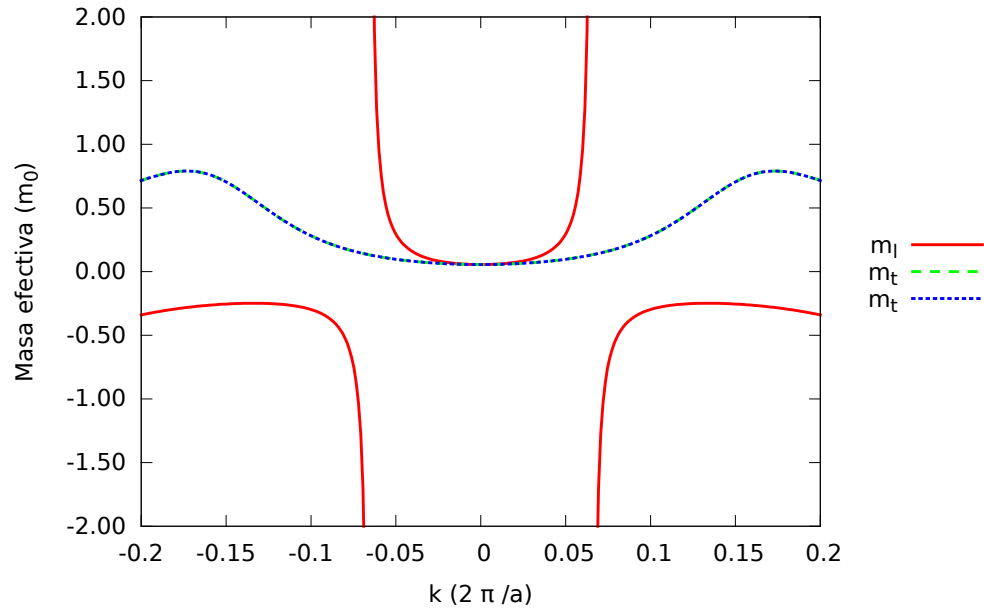


Figura 4.72: $H_{7 \times 7}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 4

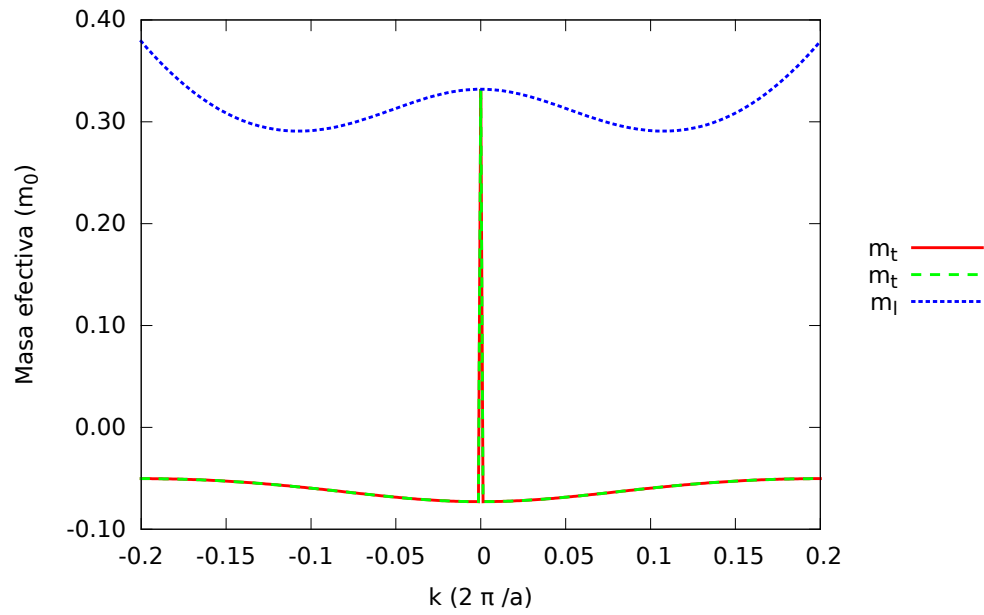


Figura 4.73: $H_{7 \times 7}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 5

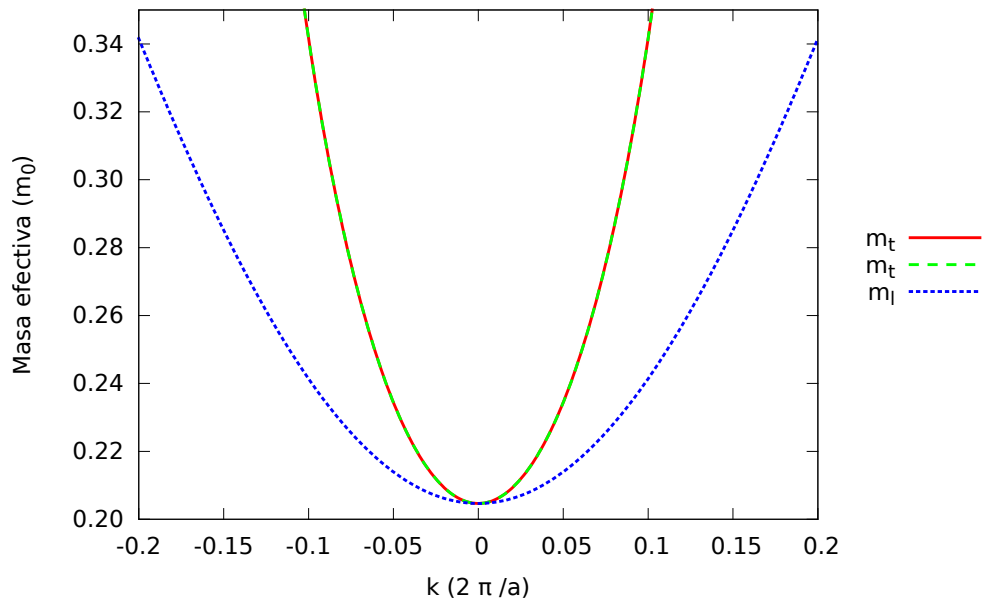


Figura 4.74: $H_{7 \times 7}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 6

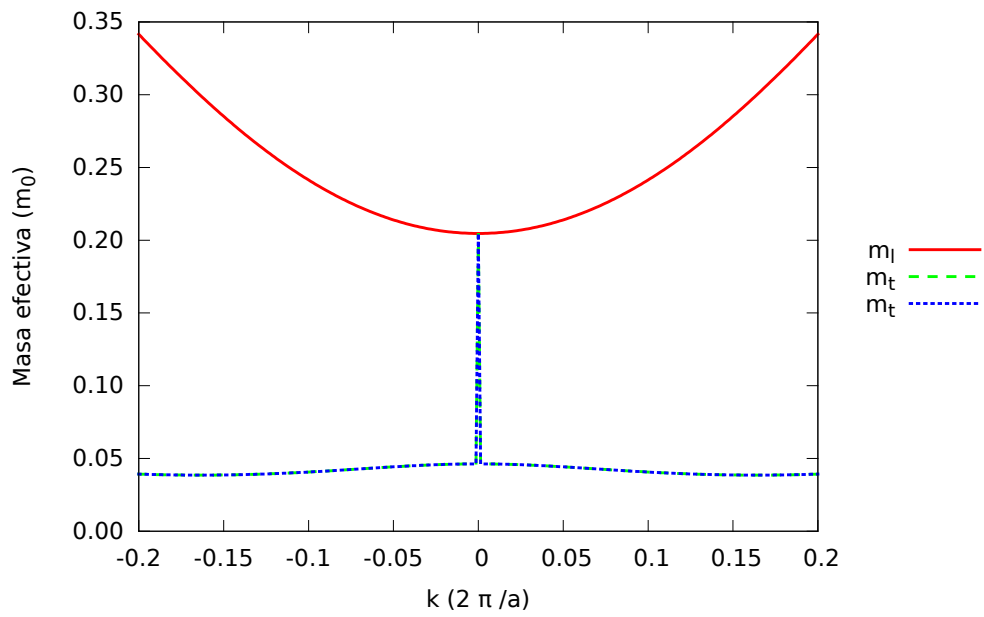


Figura 4.75: $H_{7 \times 7}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 7

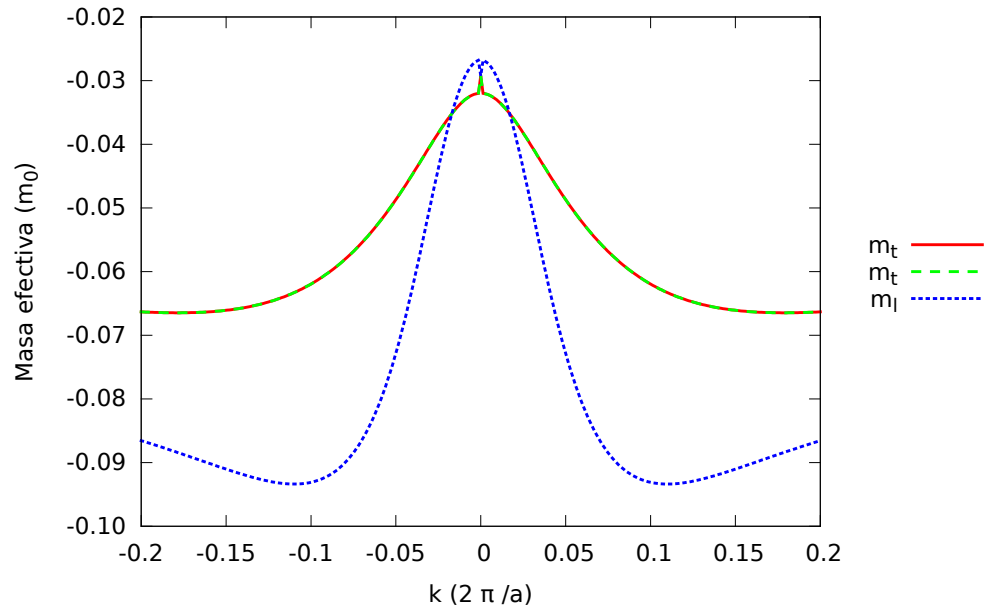


Figura 4.76: $H_{7 \times 7}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 1

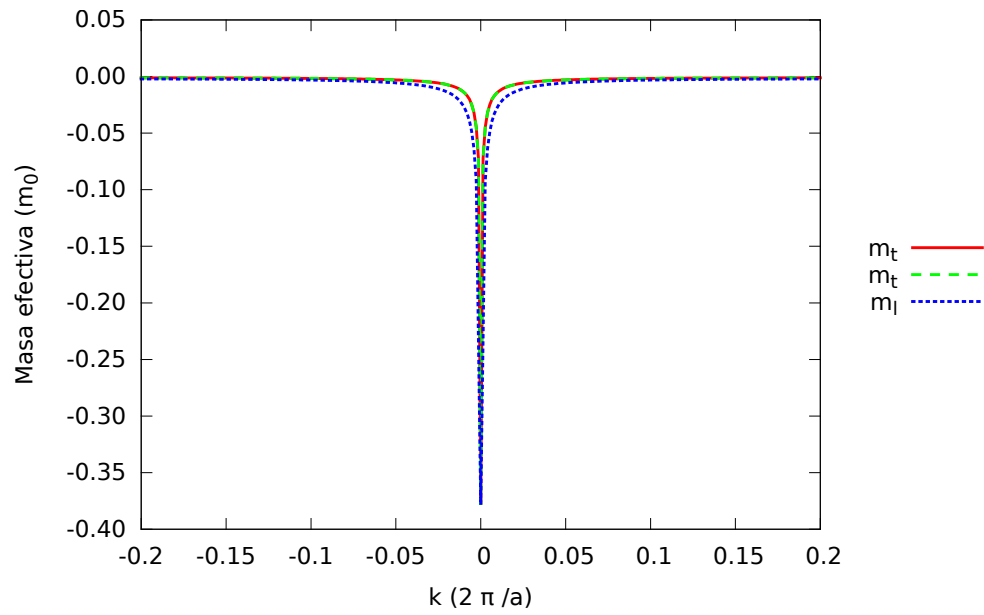


Figura 4.77: $H_{7 \times 7}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 2

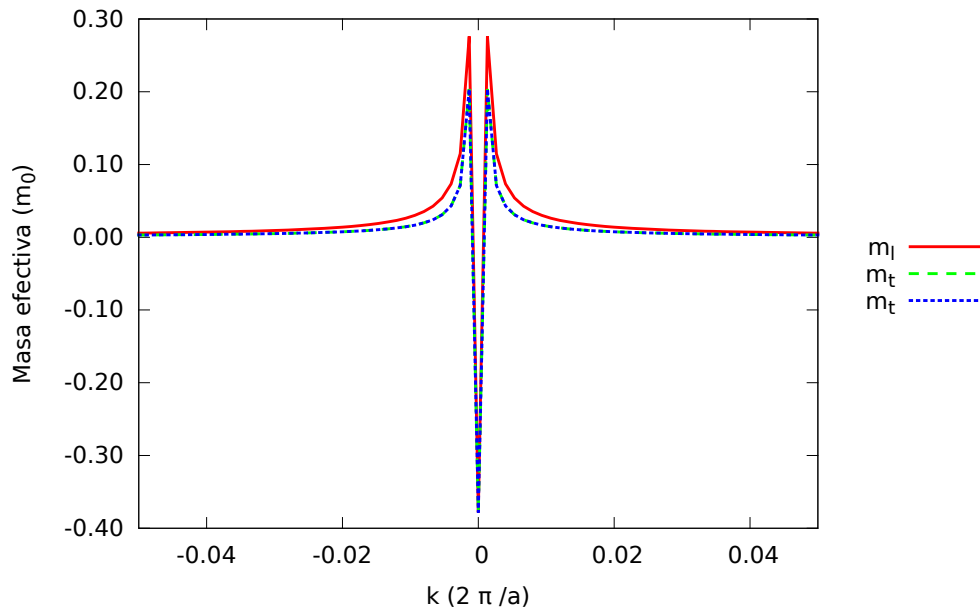


Figura 4.78: $H_{7 \times 7}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 3

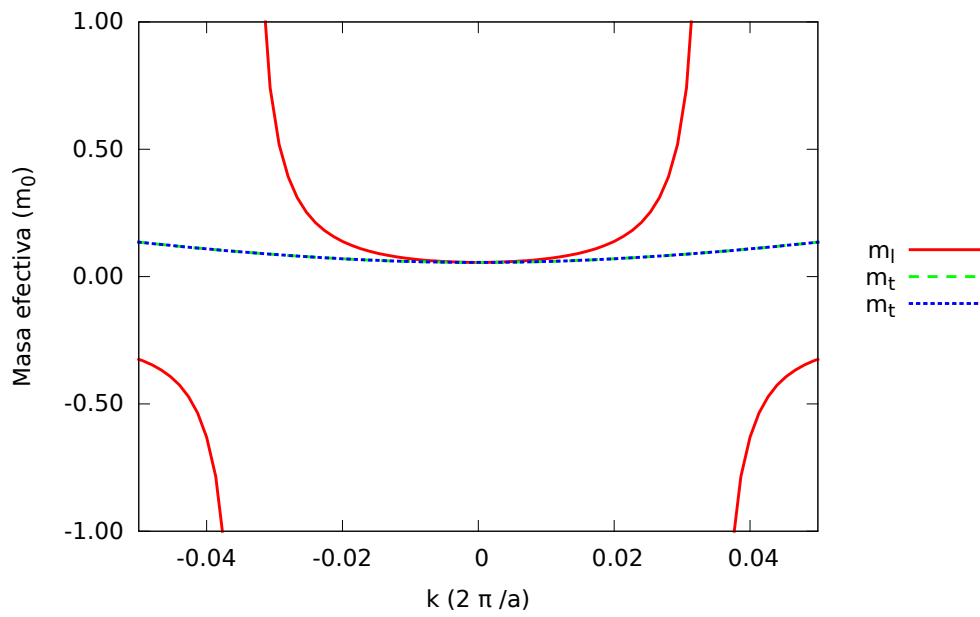


Figura 4.79: $H_{7 \times 7}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 4

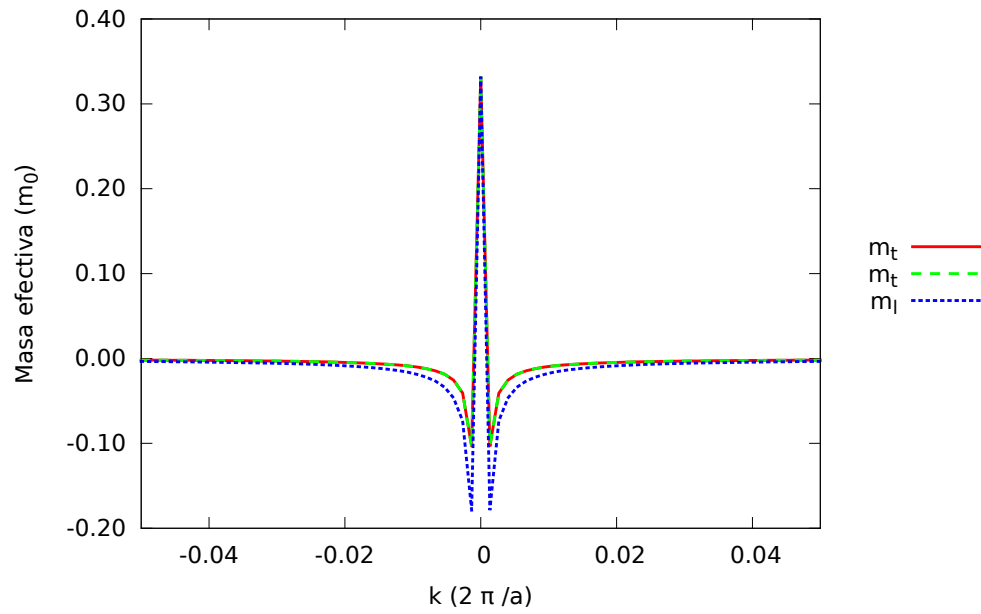


Figura 4.80: $H_{7 \times 7}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 5

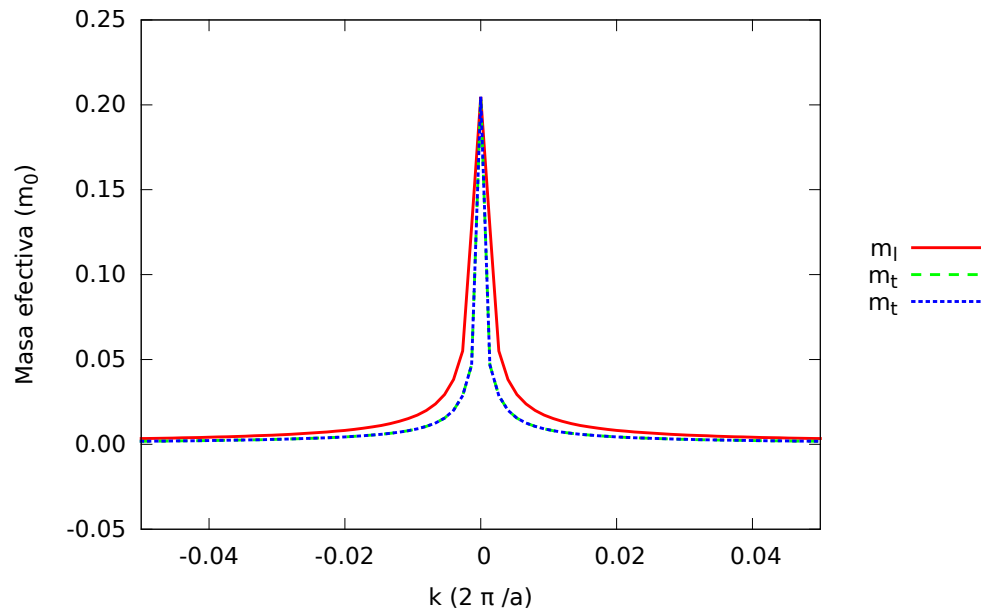


Figura 4.81: $H_{7 \times 7}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 6

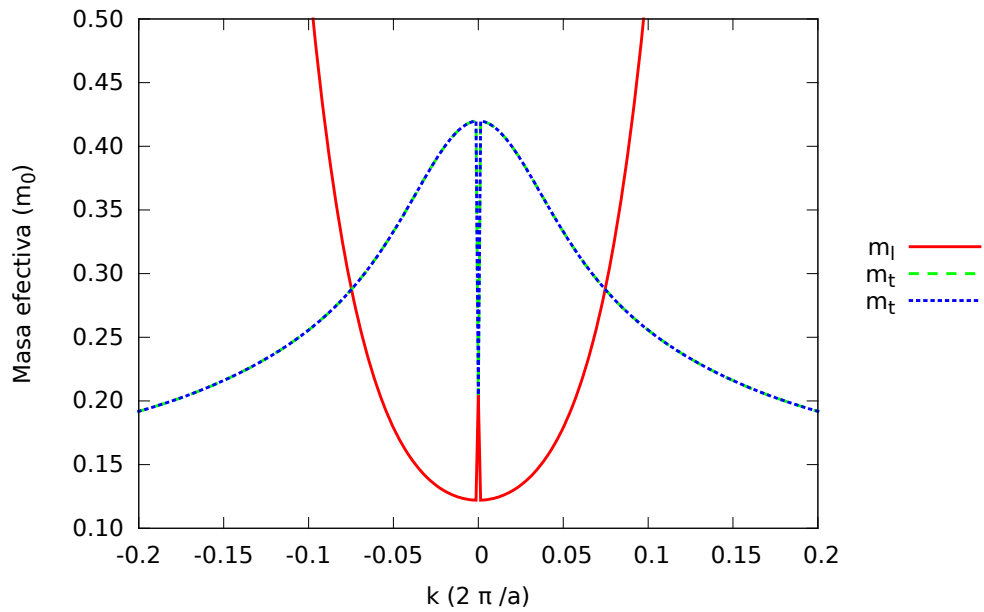


Figura 4.82: $H_{7 \times 7}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 7

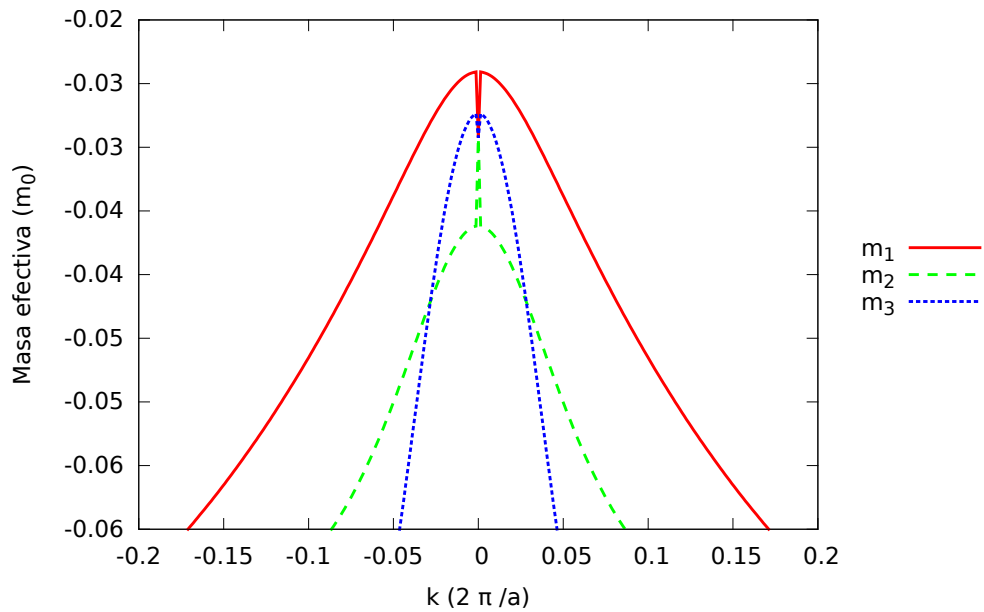


Figura 4.83: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 1

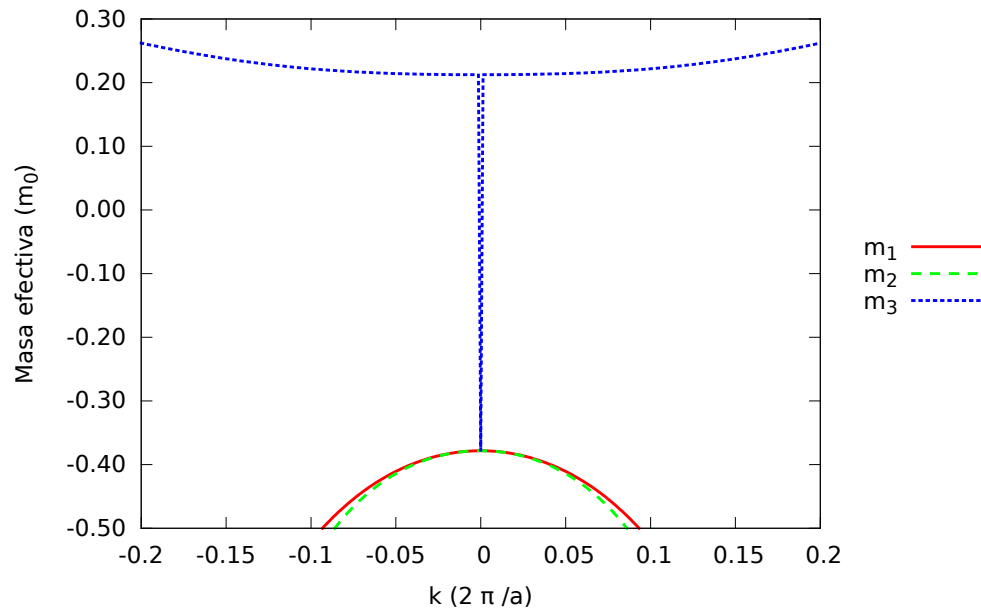


Figura 4.84: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 2

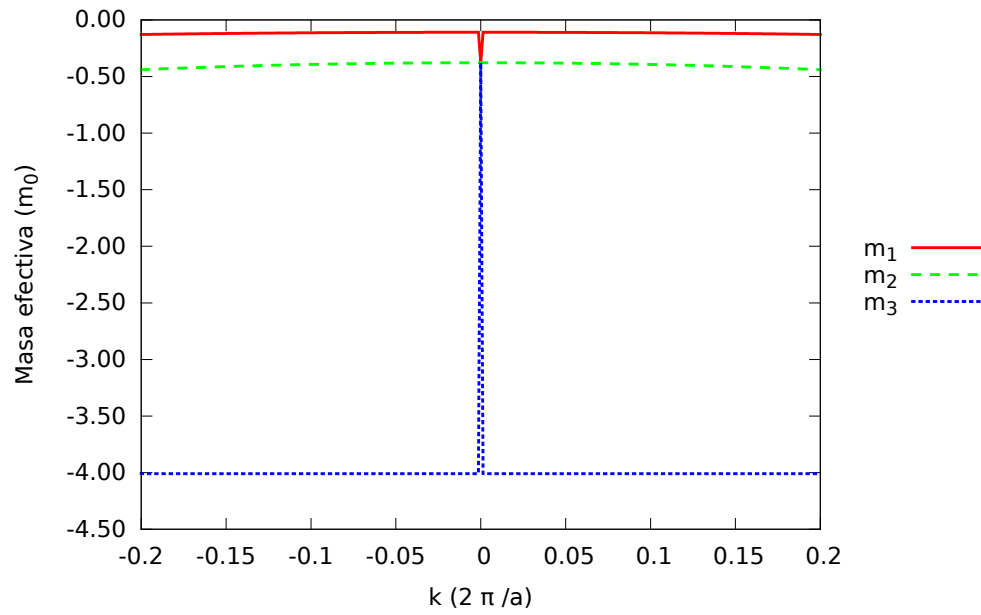


Figura 4.85: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 3

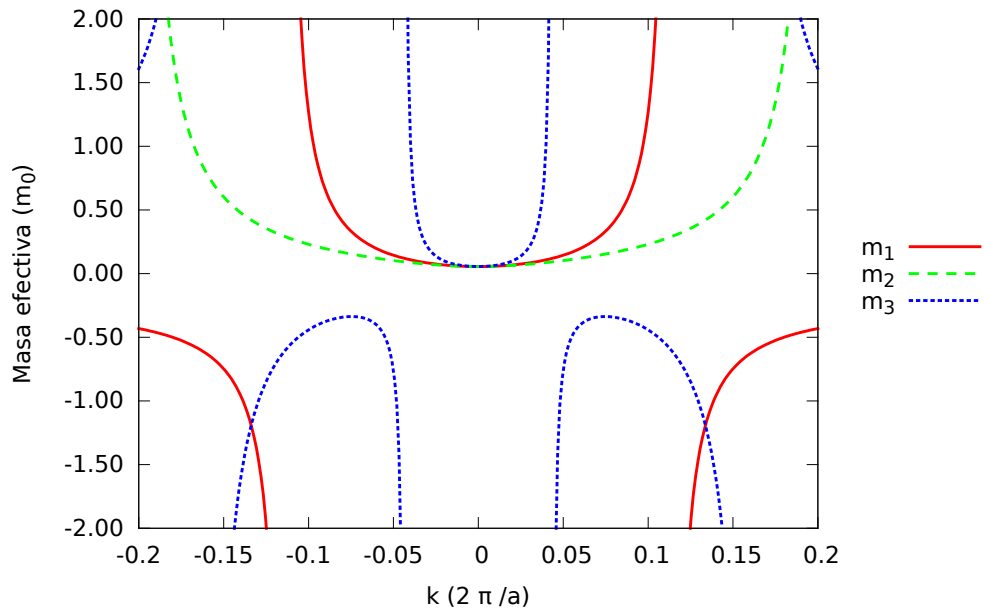


Figura 4.86: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 4

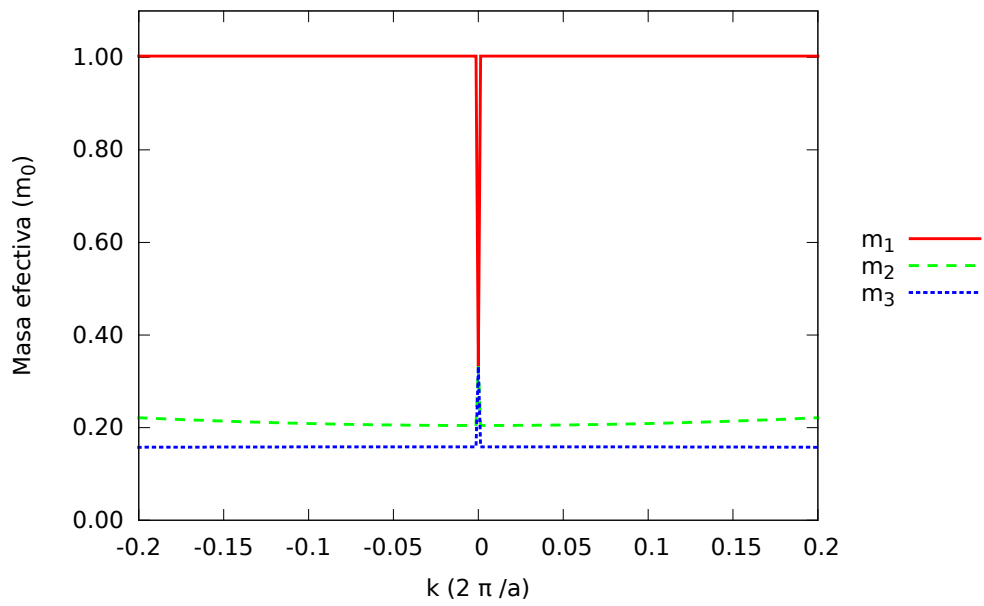


Figura 4.87: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 5

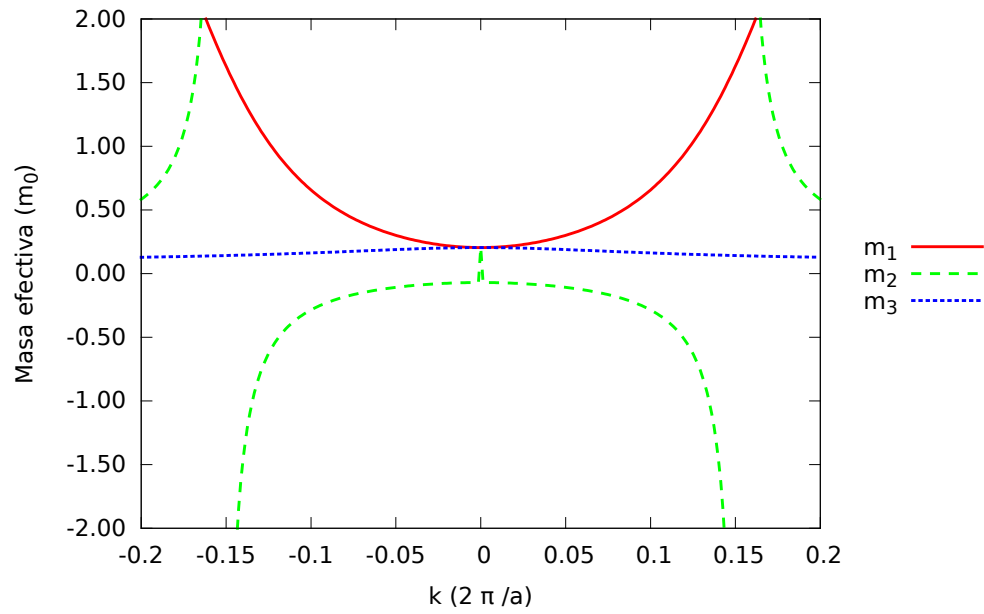


Figura 4.88: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 6

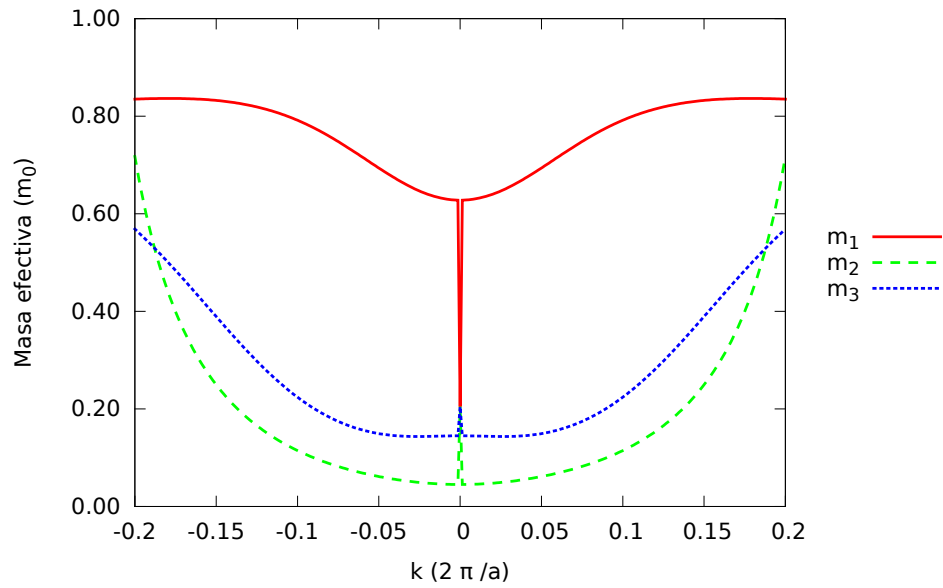


Figura 4.89: $H_{7 \times 7}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 7

■ $H_{8 \times 8}$

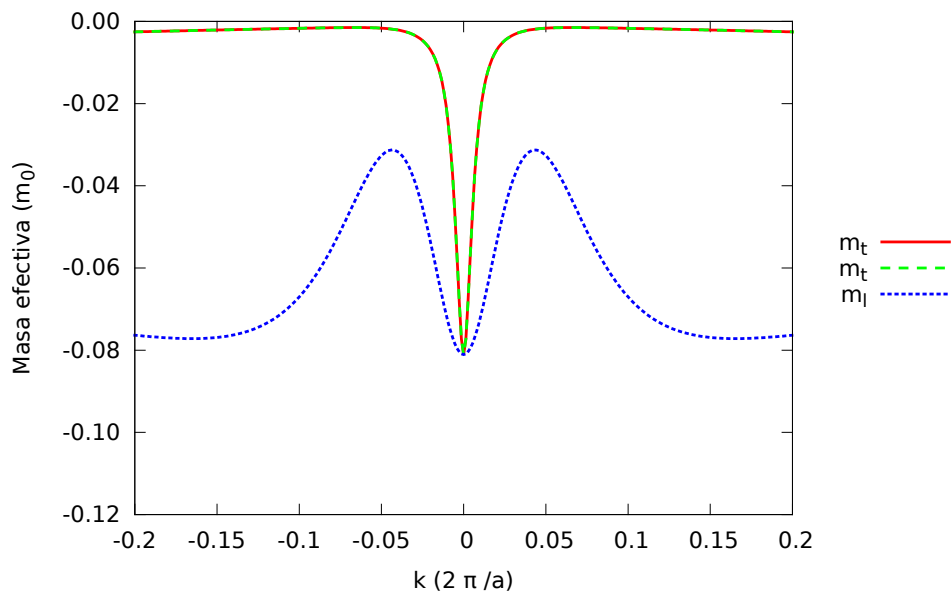


Figura 4.90: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 1

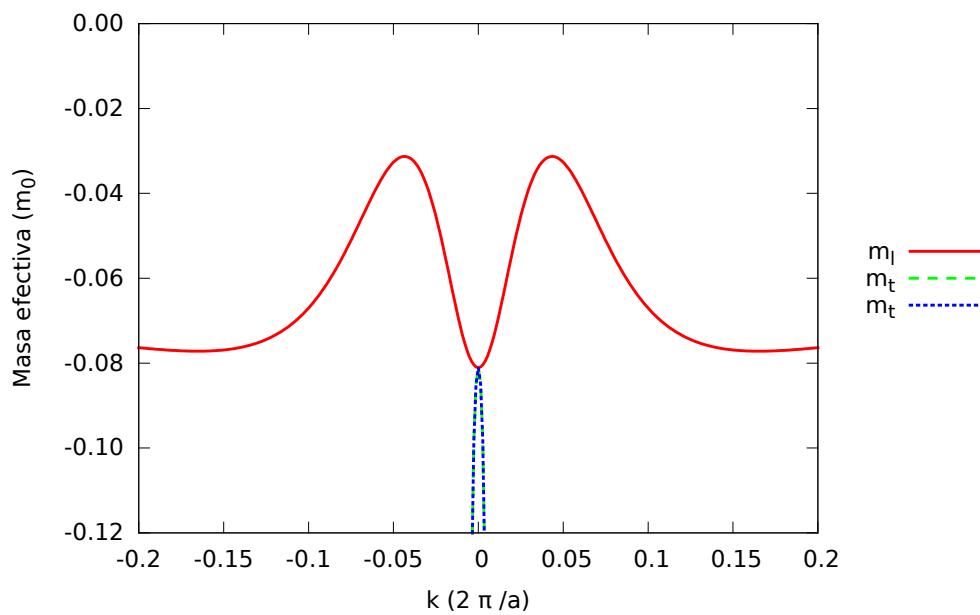


Figura 4.91: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 2

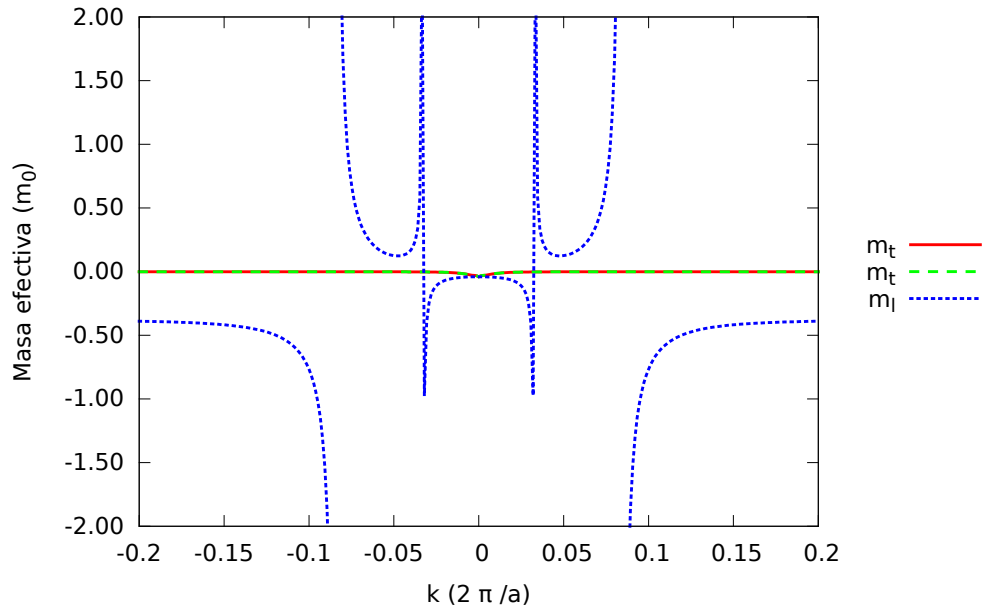


Figura 4.92: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 3

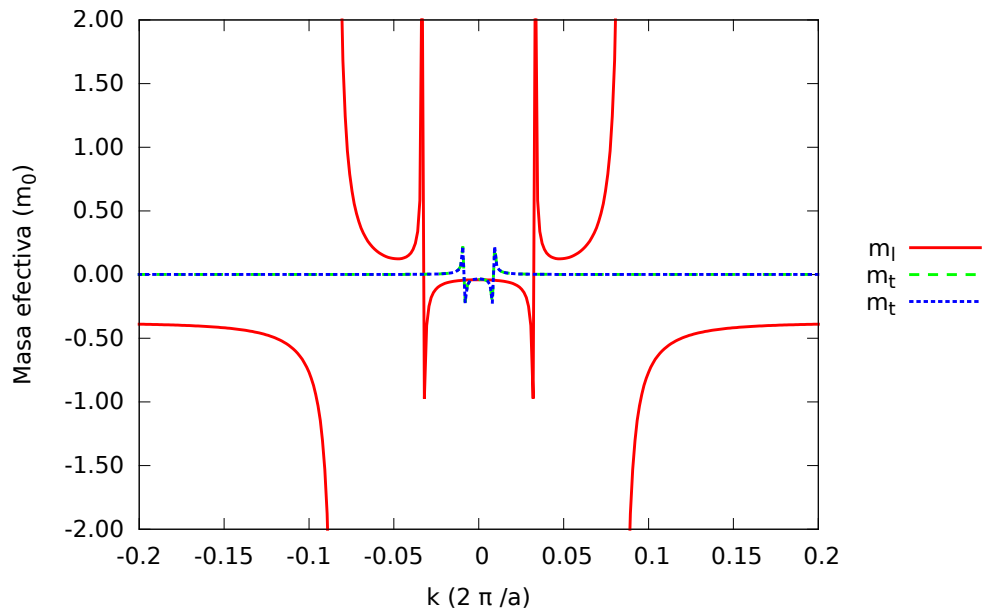


Figura 4.93: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 4

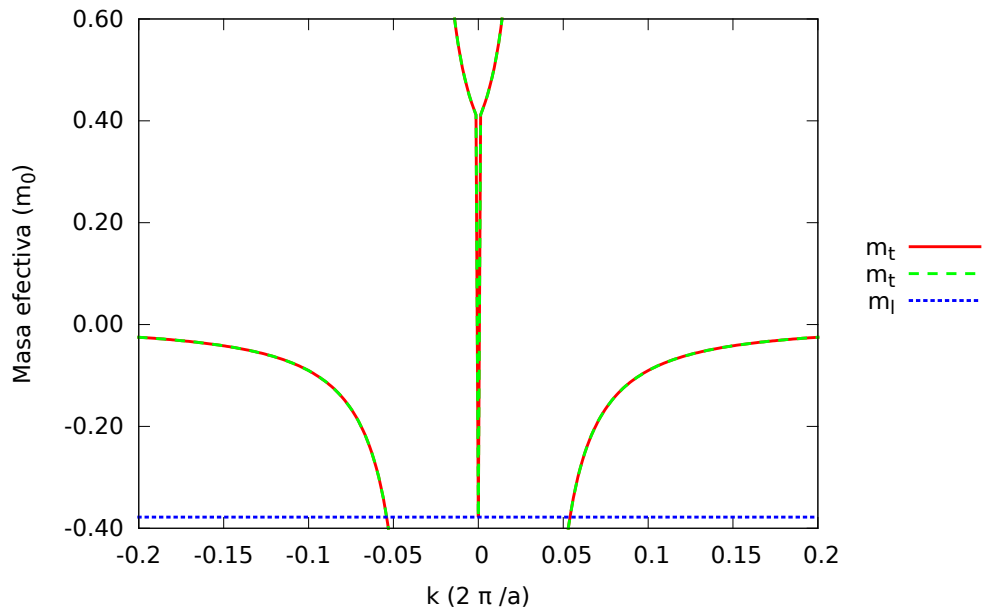


Figura 4.94: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 5

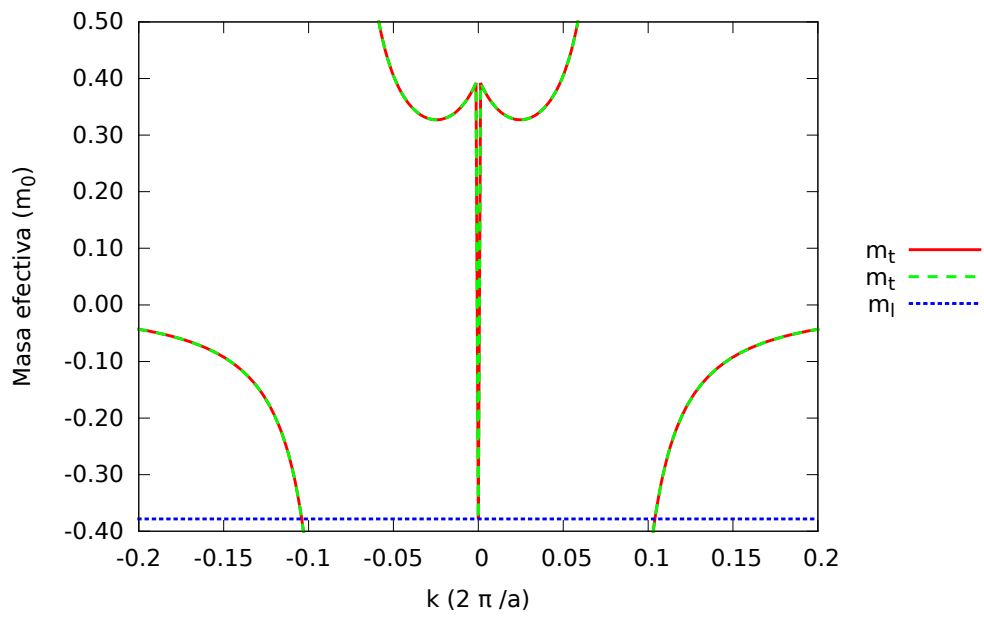


Figura 4.95: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 6

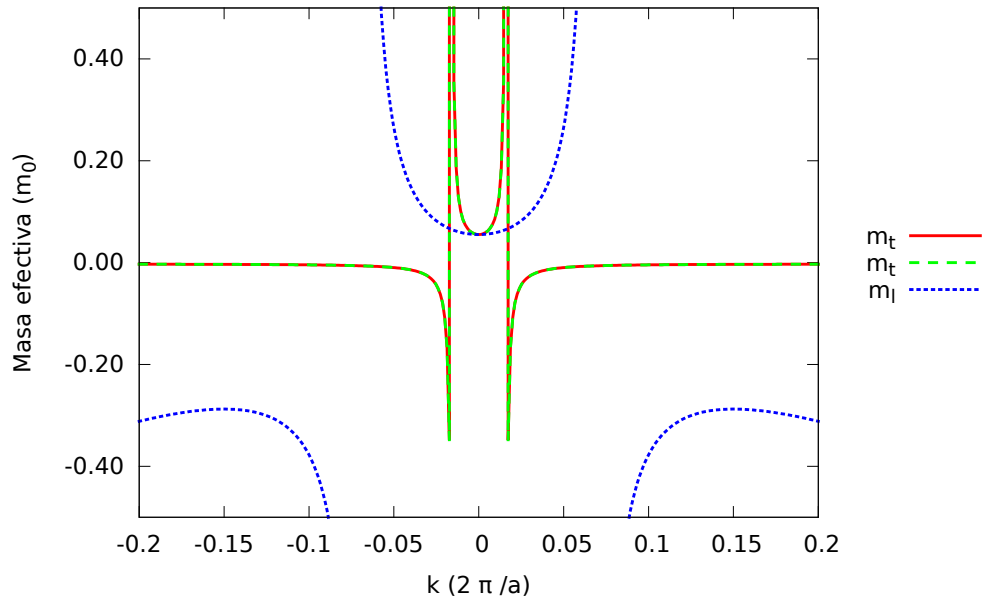


Figura 4.96: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 7

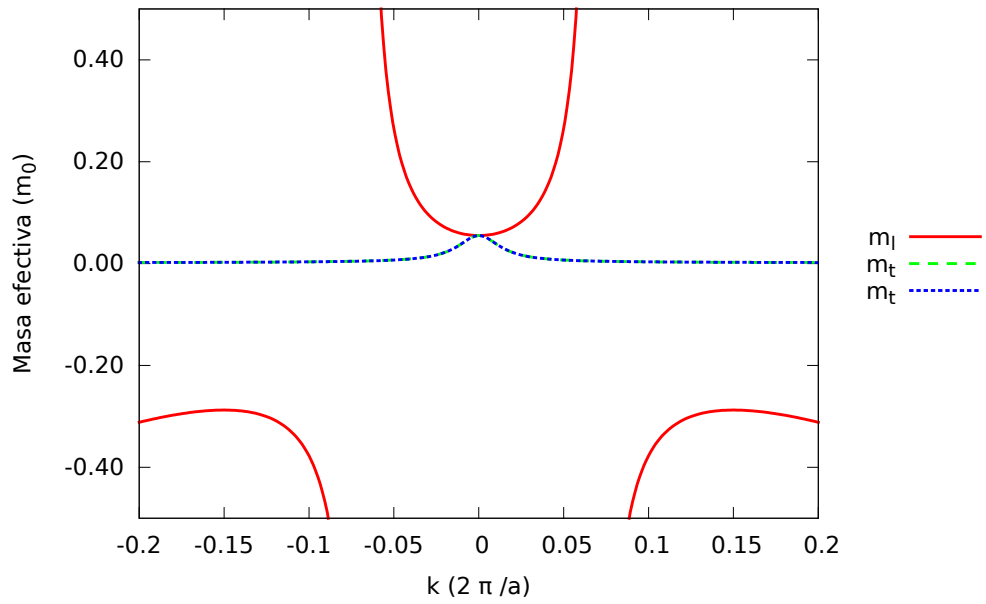


Figura 4.97: $H_{8 \times 8}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 8

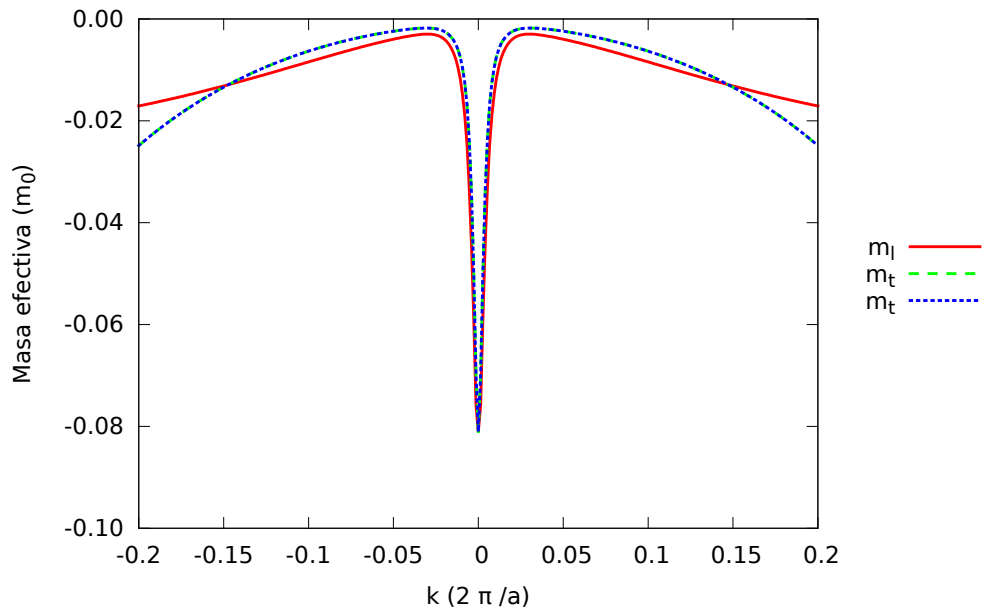


Figura 4.98: $H_{8 \times 8}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 1

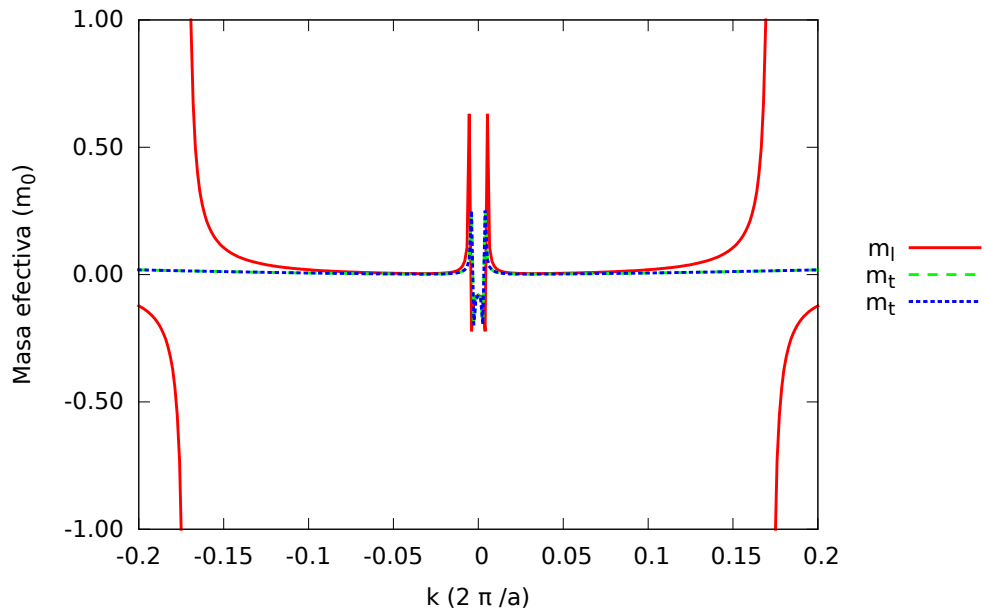


Figura 4.99: $H_{8 \times 8}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 2

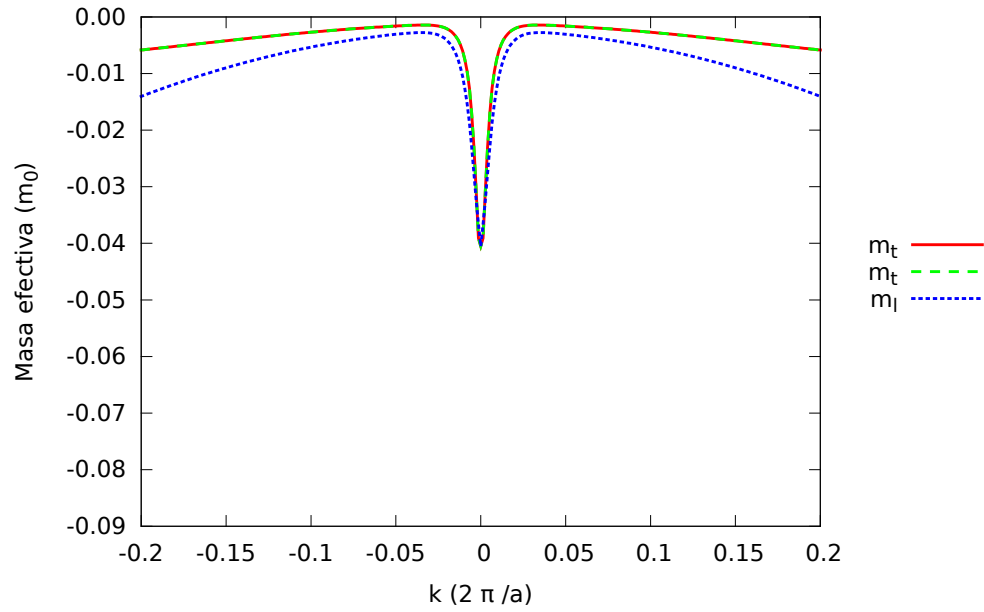


Figura 4.100: $H_{8 \times 8}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 3

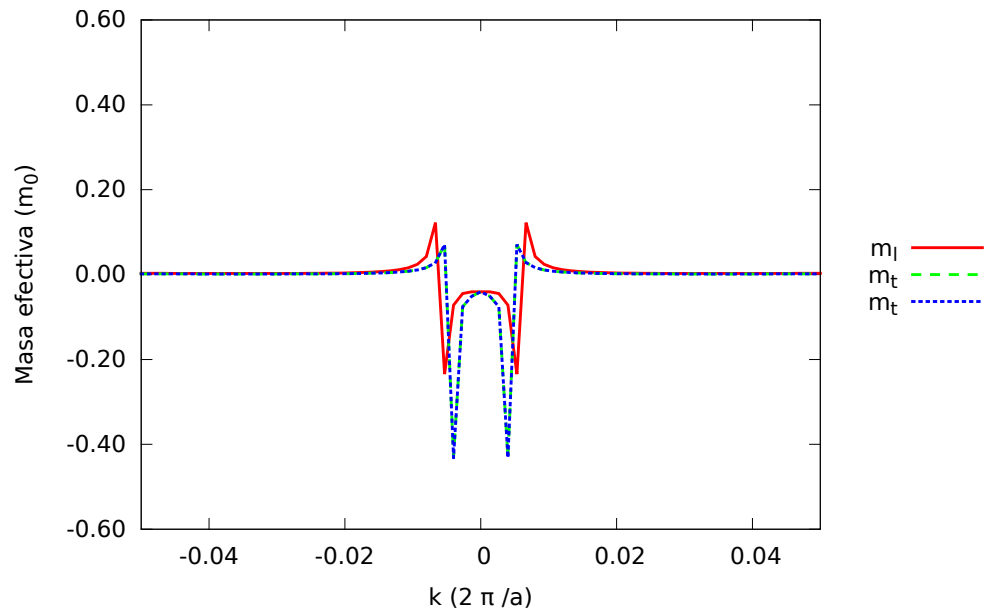


Figura 4.101: $H_{8 \times 8}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 4

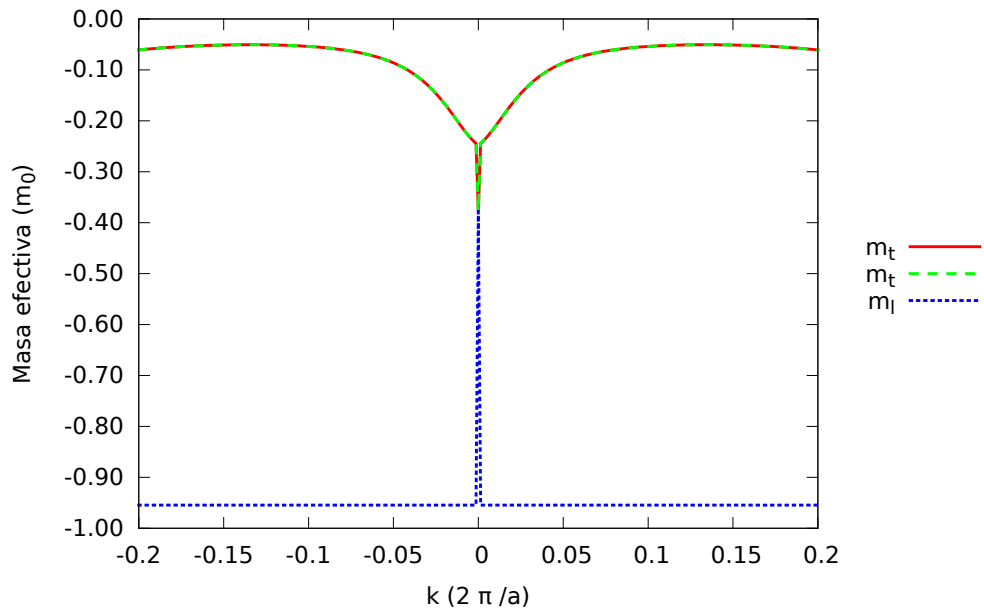


Figura 4.102: $H_{8 \times 8}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 5

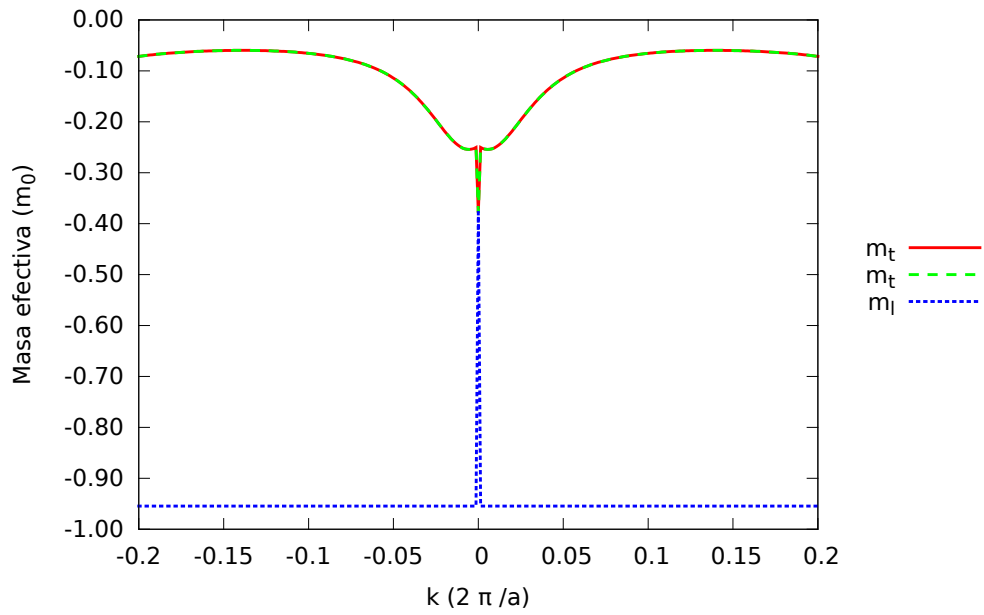


Figura 4.103: $H_{8 \times 8}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 6

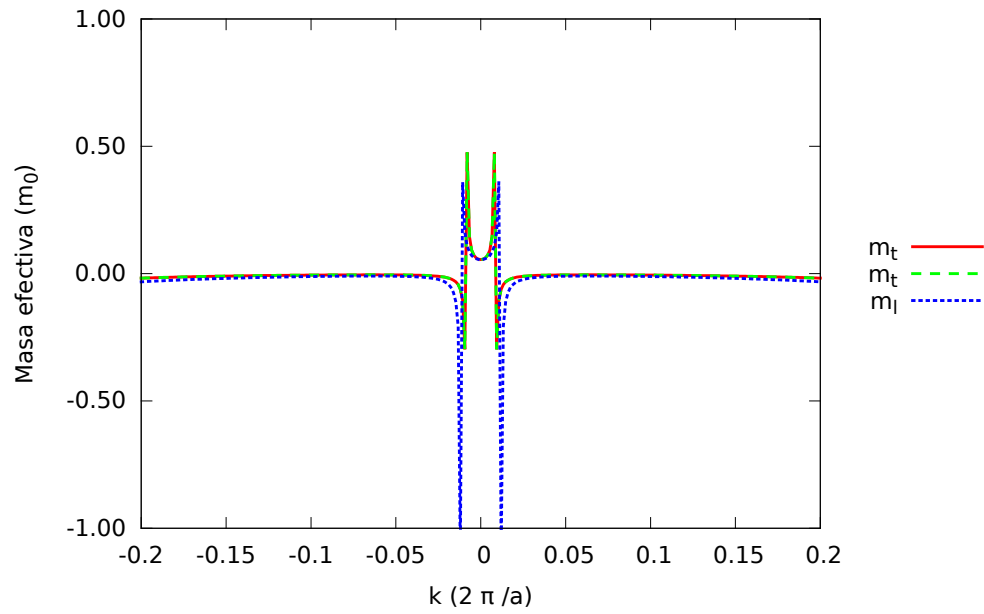


Figura 4.104: $H_{8 \times 8}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 7

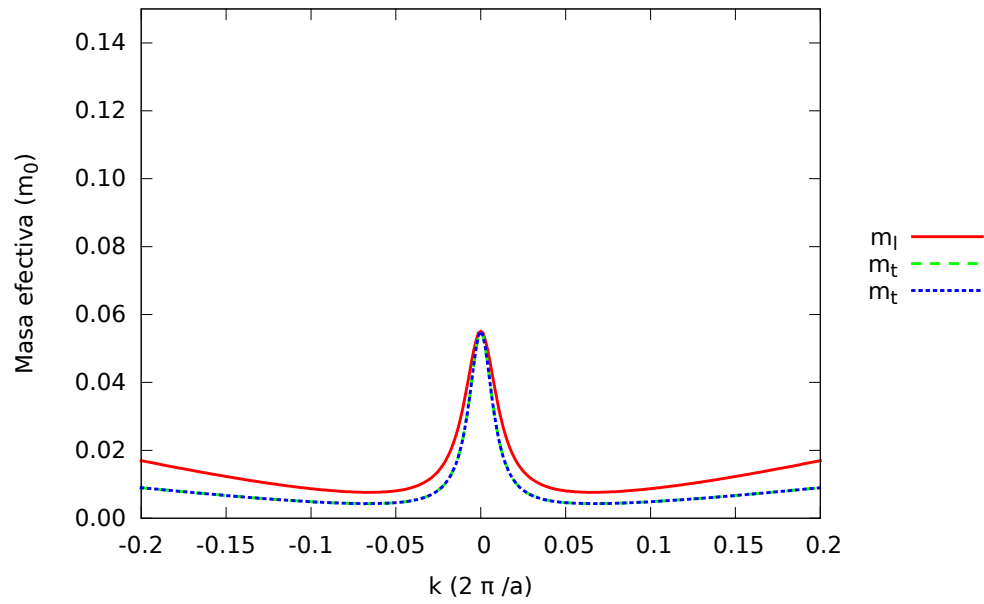


Figura 4.105: $H_{8 \times 8}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 8

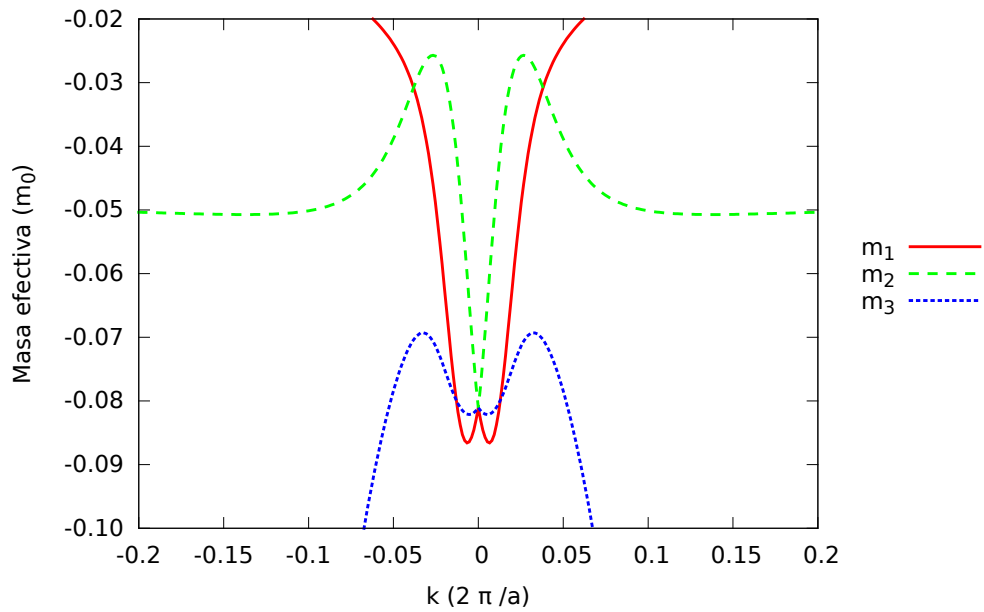


Figura 4.106: $H_{8 \times 8}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 1

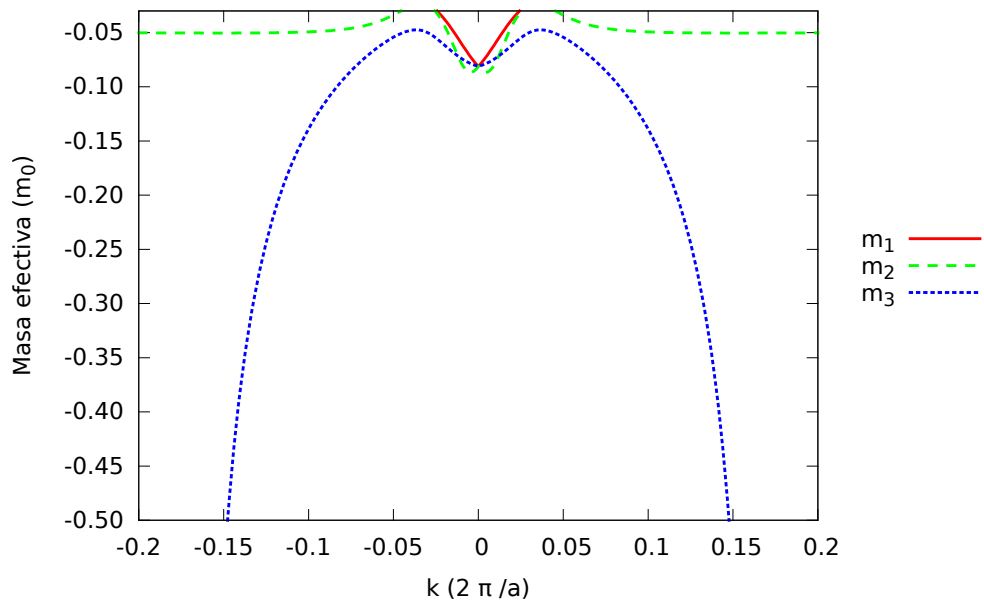


Figura 4.107: $H_{8 \times 8}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 2

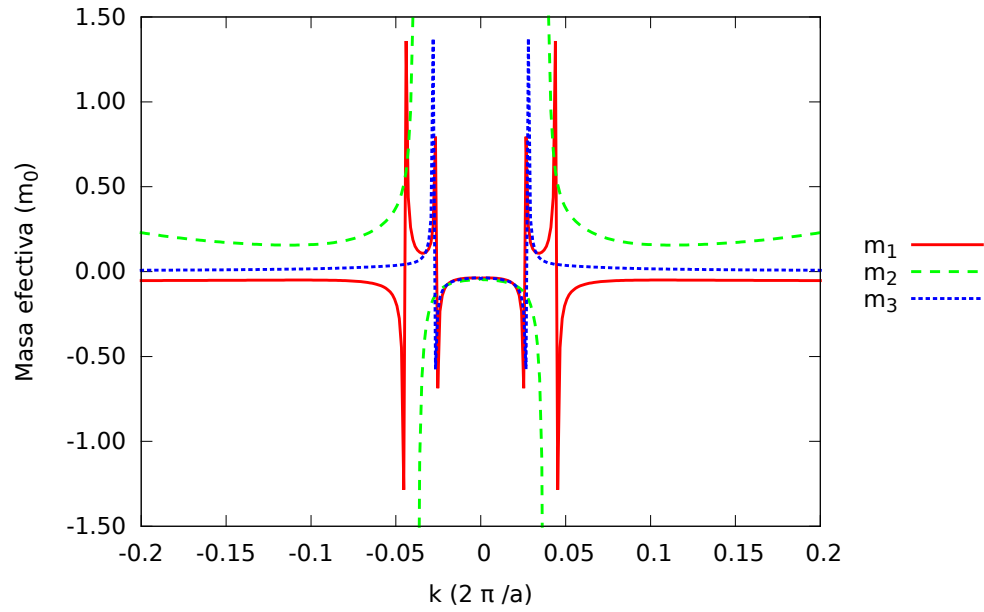


Figura 4.108: $H_{8 \times 8}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 3

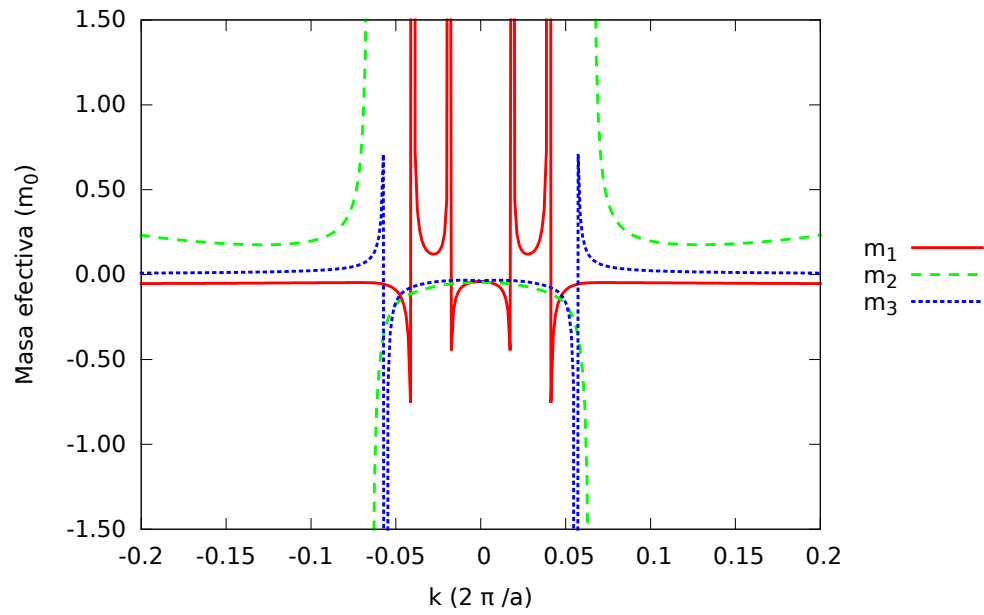


Figura 4.109: $H_{8 \times 8}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 4

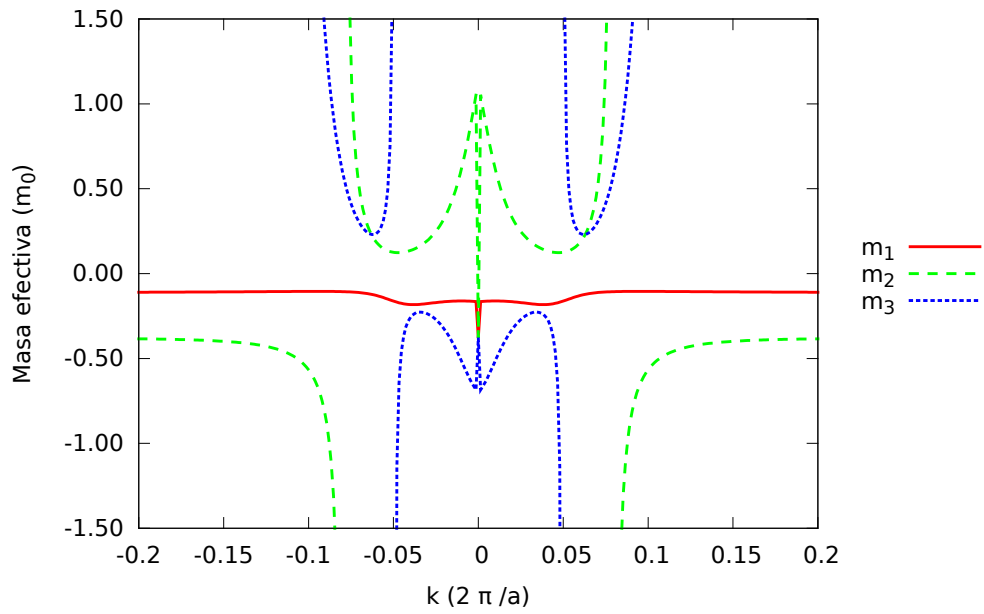


Figura 4.110: $H_{8 \times 8}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 5

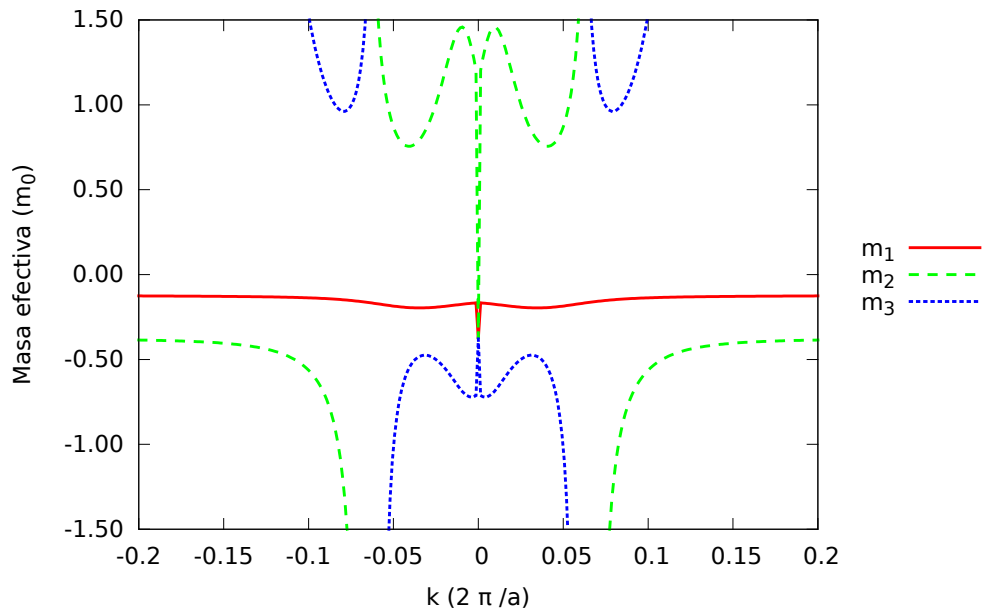
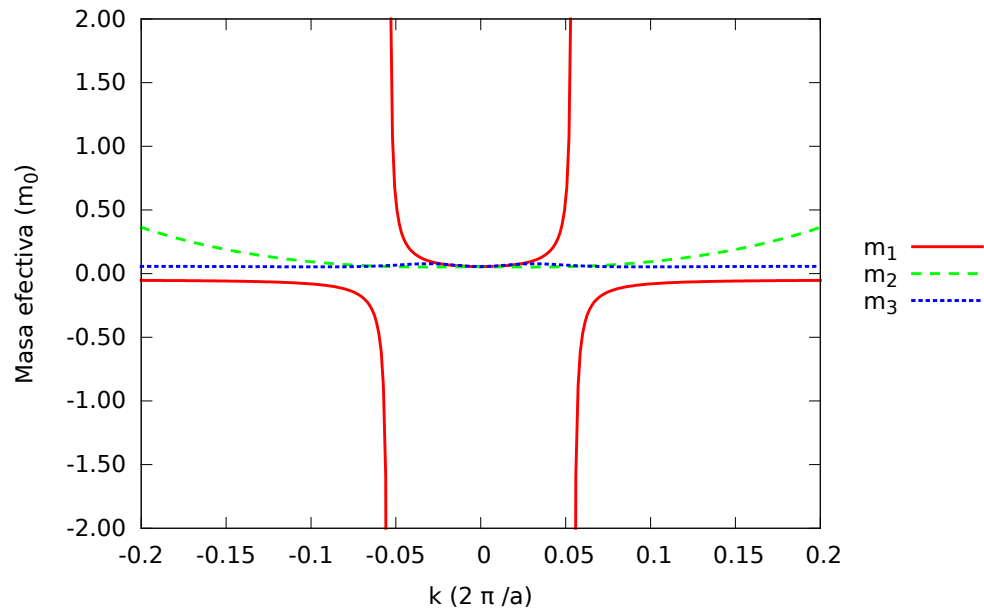
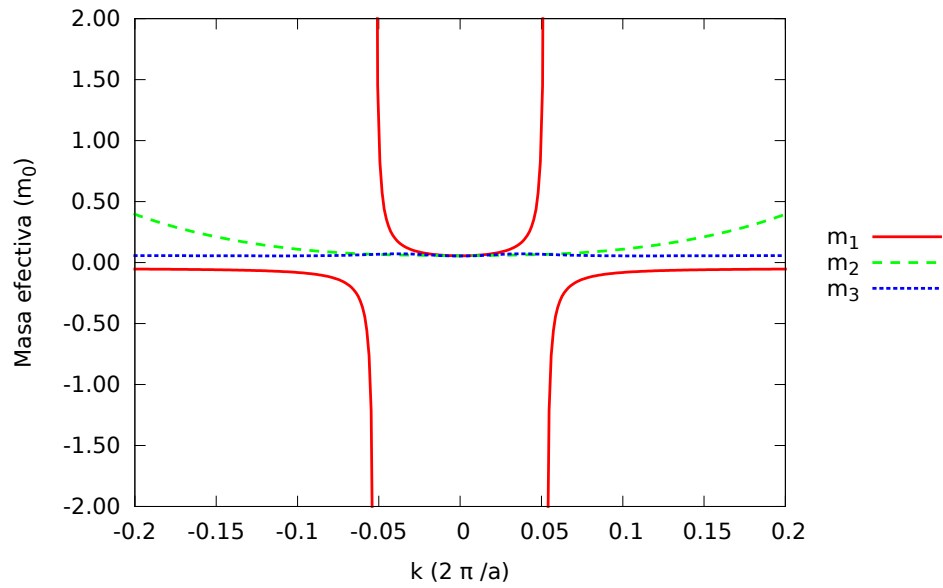


Figura 4.111: $H_{8 \times 8}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 6

Figura 4.112: $H_{8 \times 8}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 7Figura 4.113: $H_{8 \times 8}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 8

■ $H_{8 \times 8}(k\pi)$

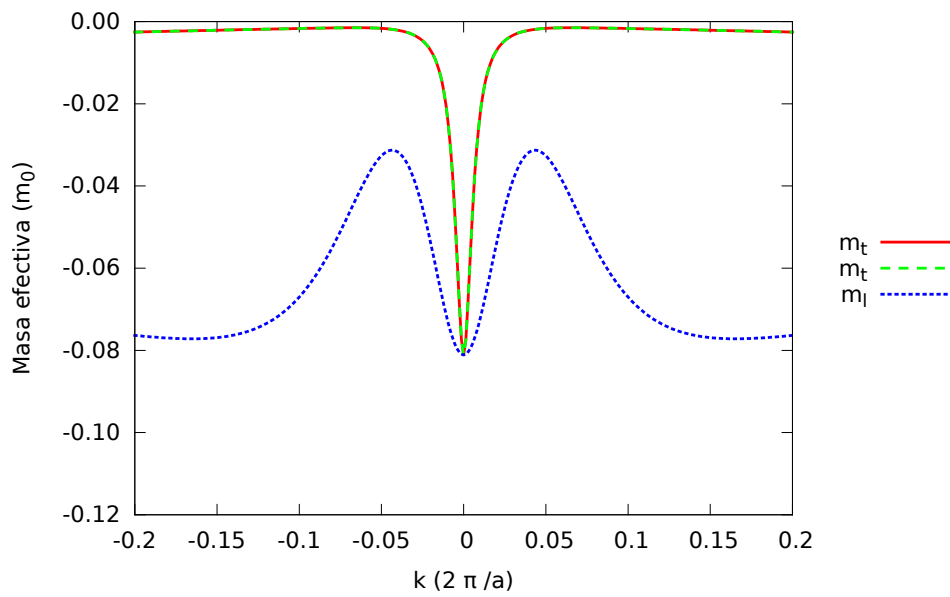


Figura 4.114: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje delta banda 1

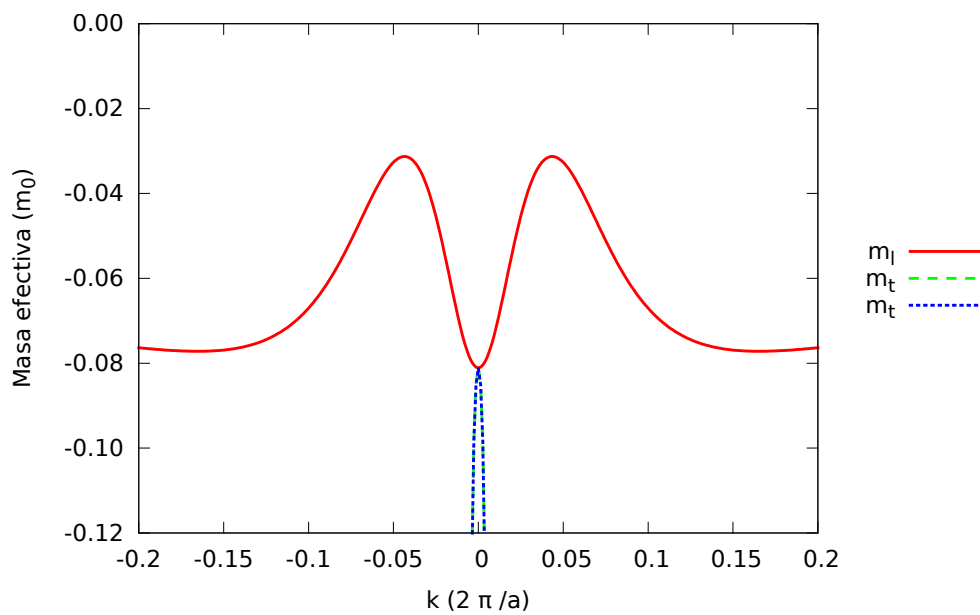


Figura 4.115: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje delta banda 2

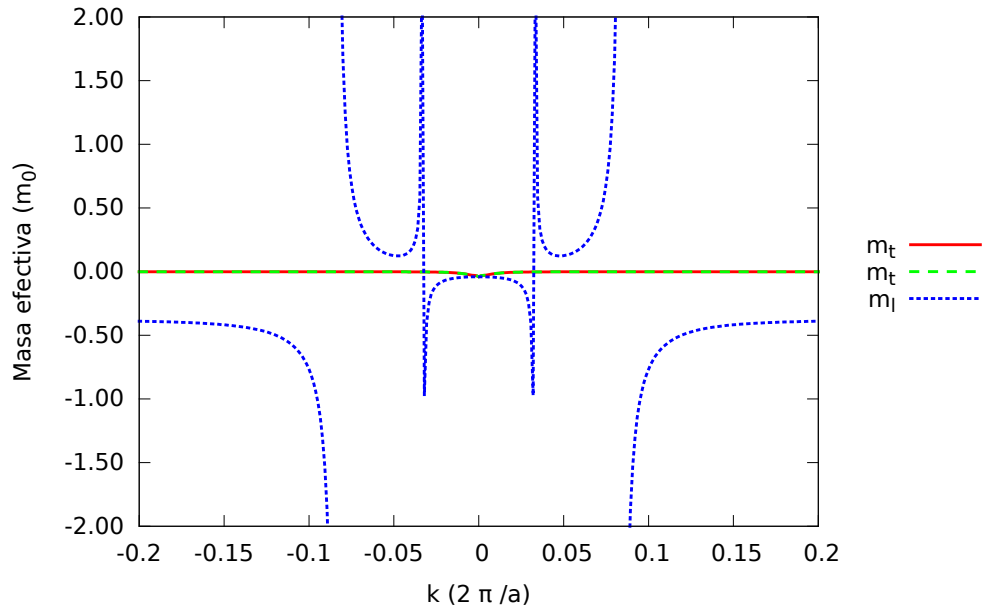


Figura 4.116: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje delta banda 3

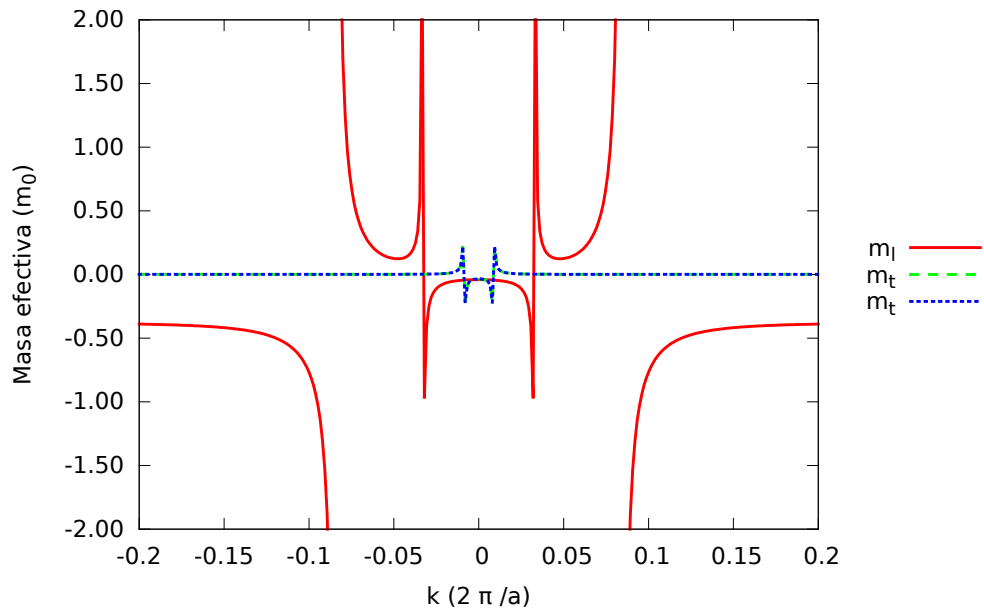


Figura 4.117: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje delta banda 4

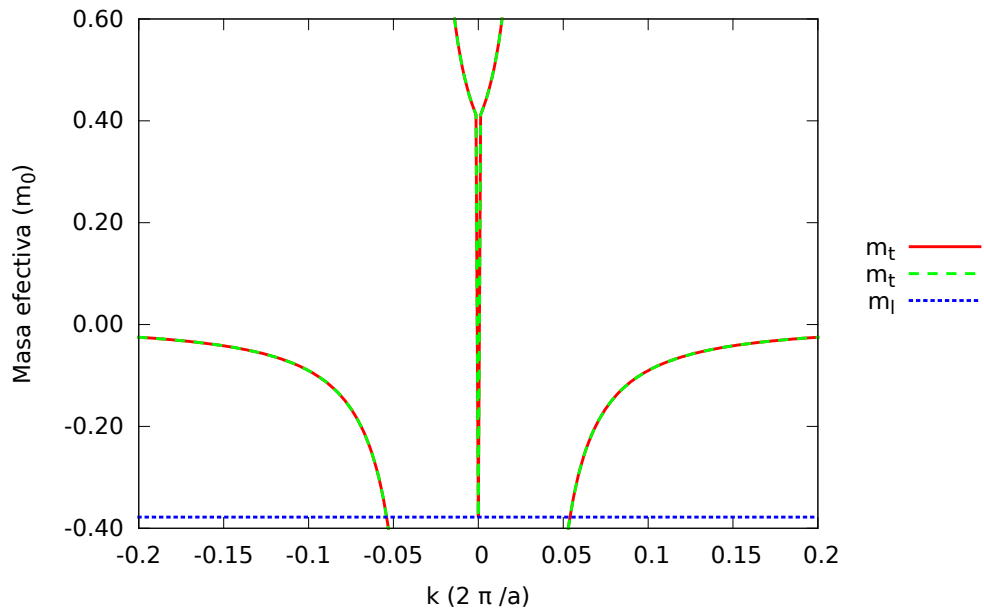


Figura 4.118: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje delta banda 5

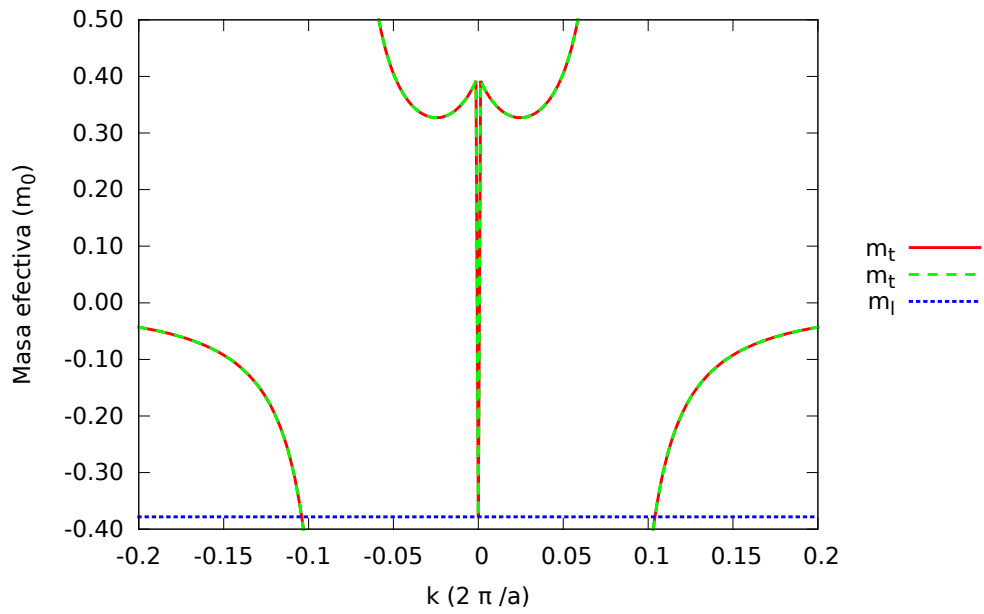


Figura 4.119: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje delta banda 6

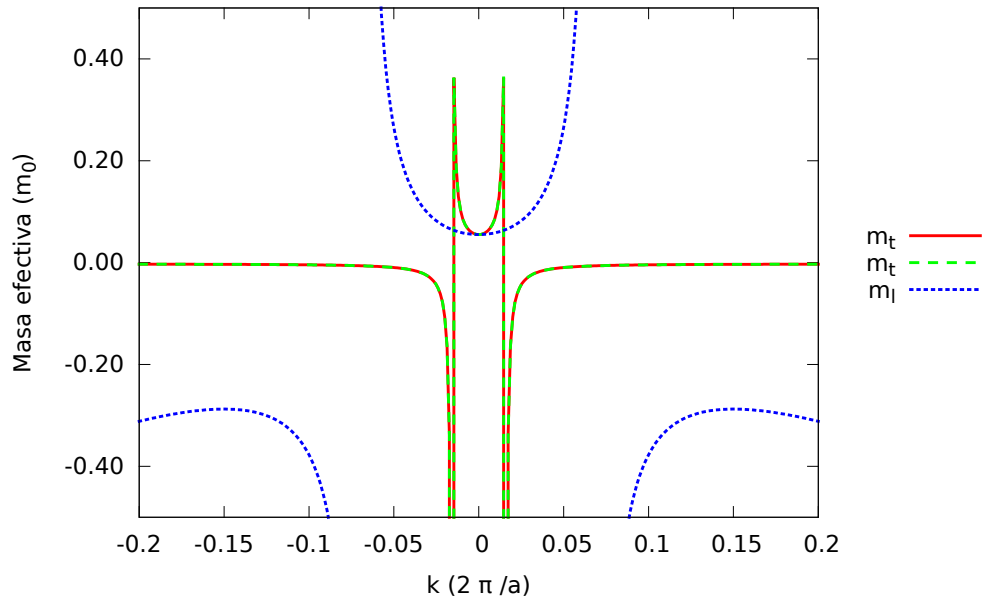


Figura 4.120: $H_{8 \times 8(k\pi)}$ eje delta banda 7

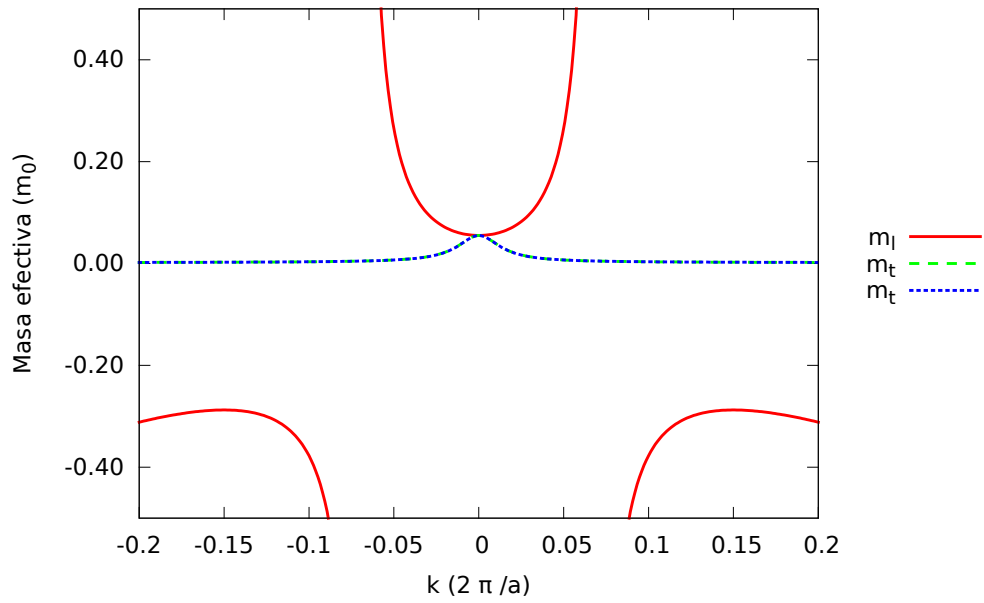


Figura 4.121: $H_{8 \times 8(k\pi)}$ eje delta banda 8

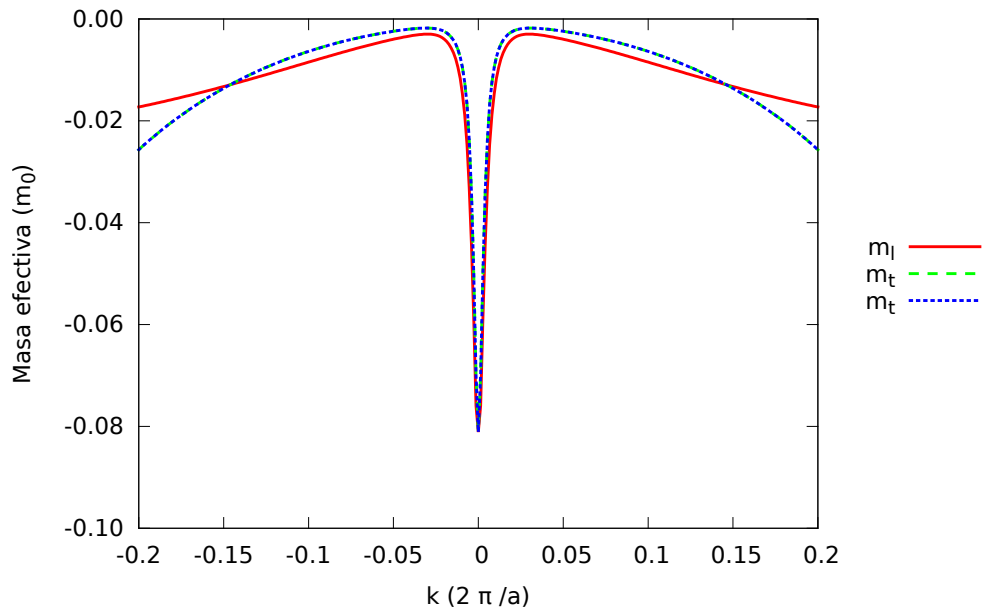


Figura 4.122: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 1

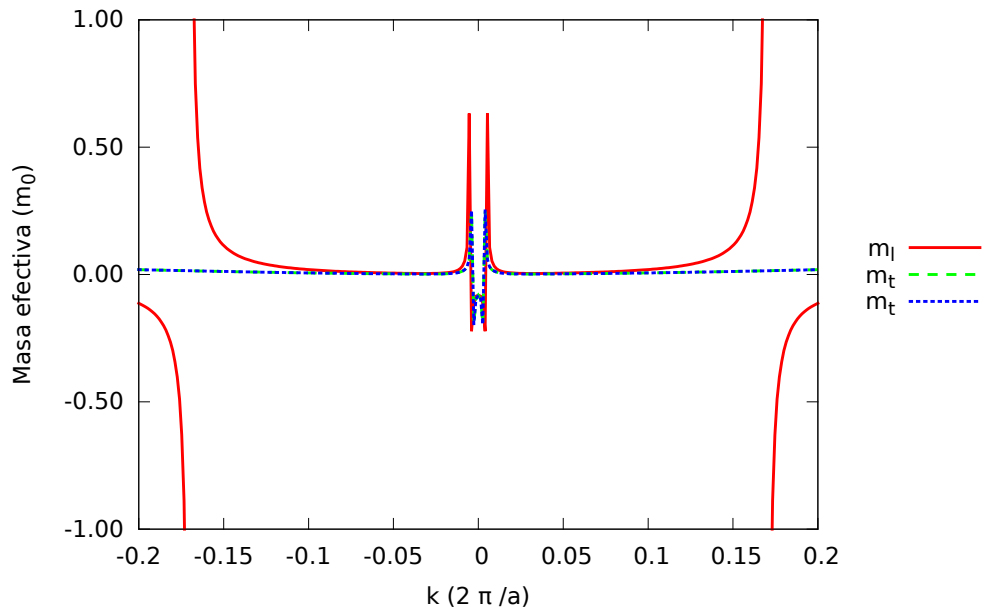


Figura 4.123: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 2

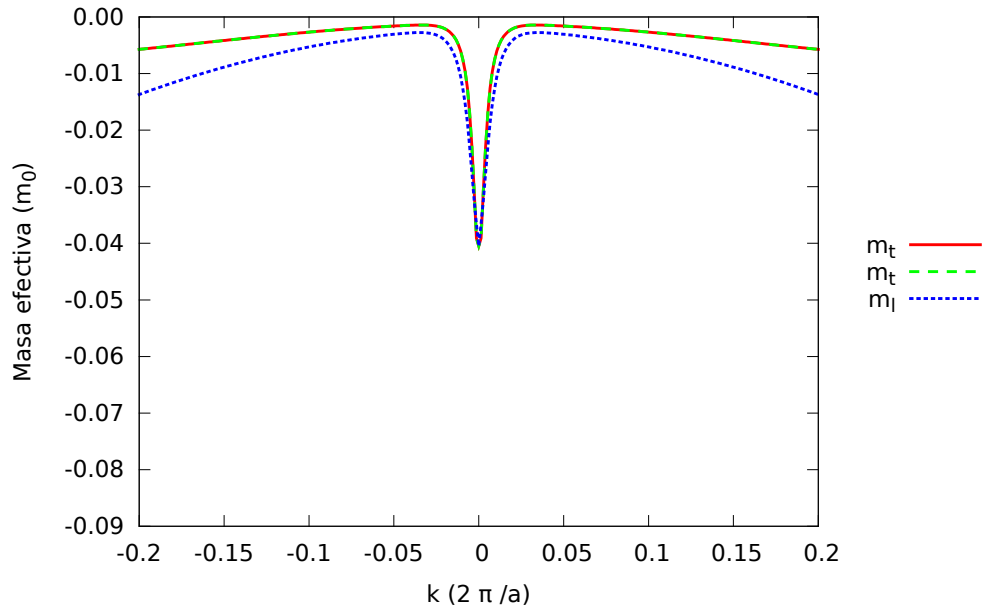


Figura 4.124: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 3

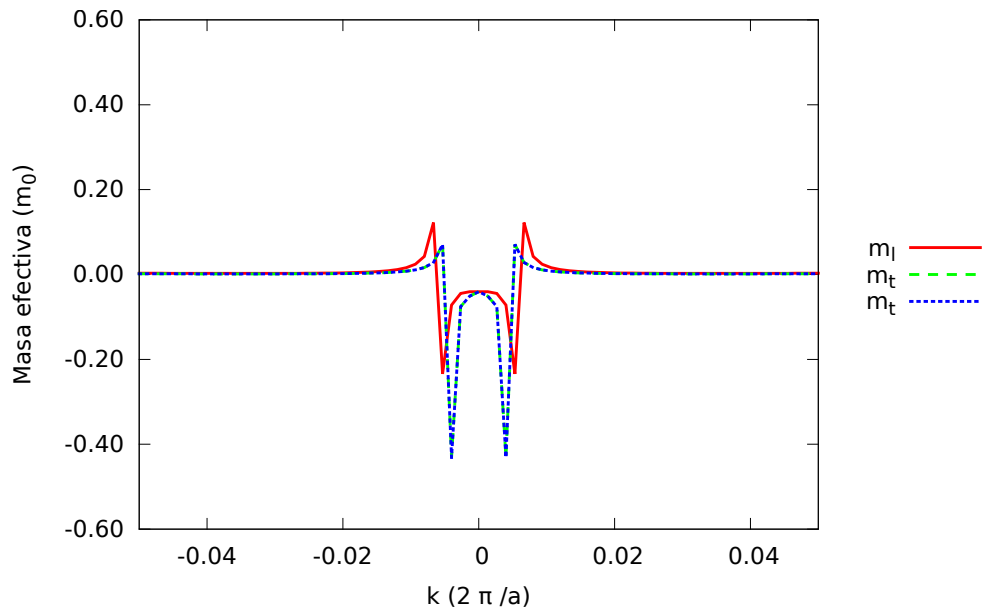


Figura 4.125: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 4

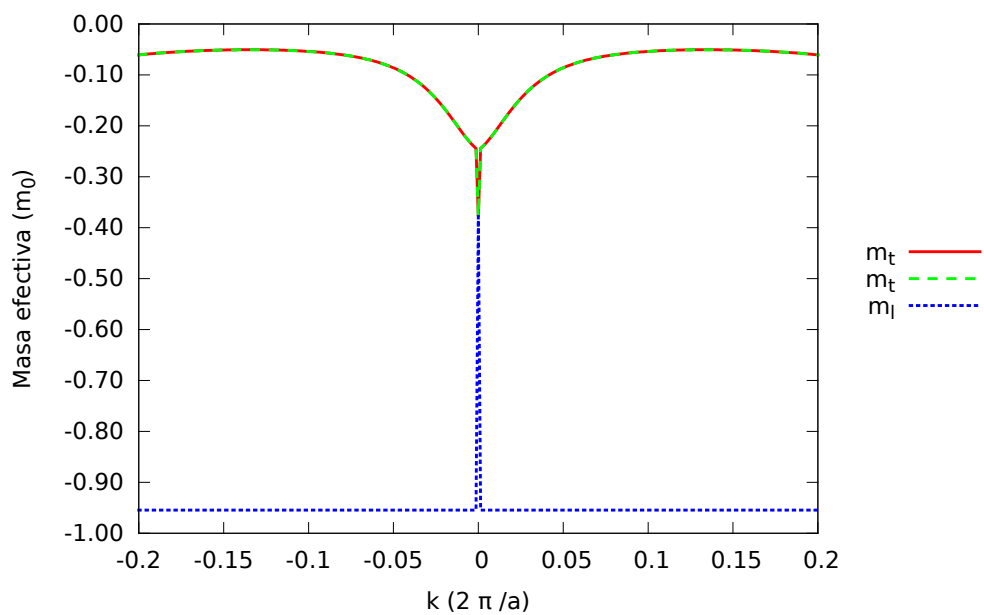


Figura 4.126: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 5

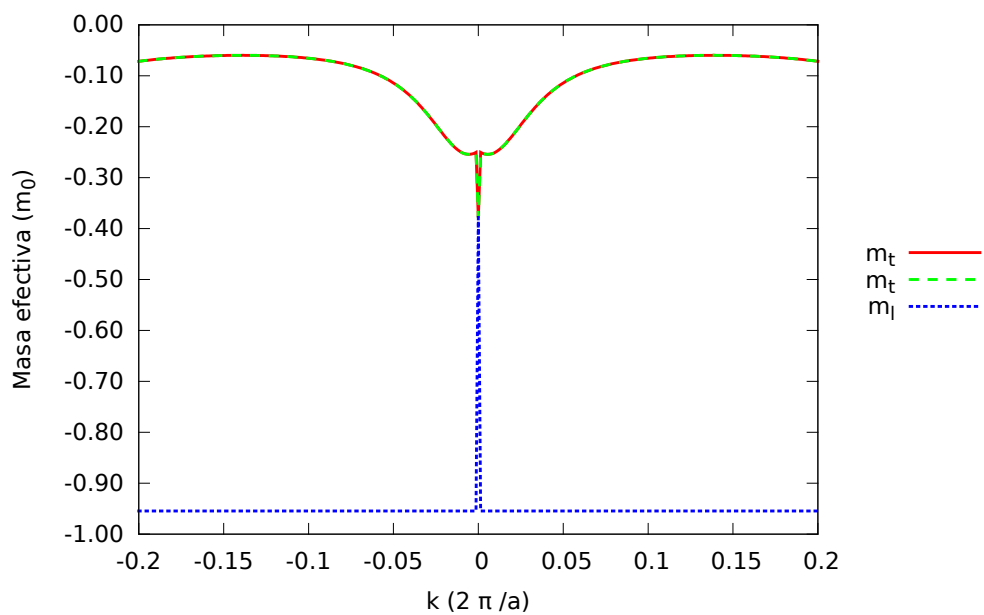


Figura 4.127: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 6

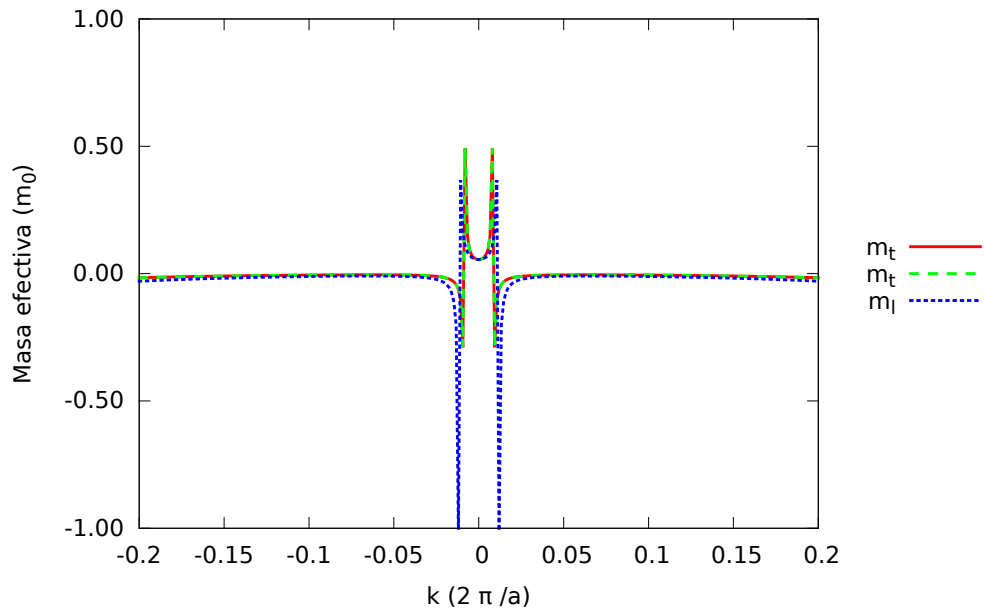


Figura 4.128: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 7

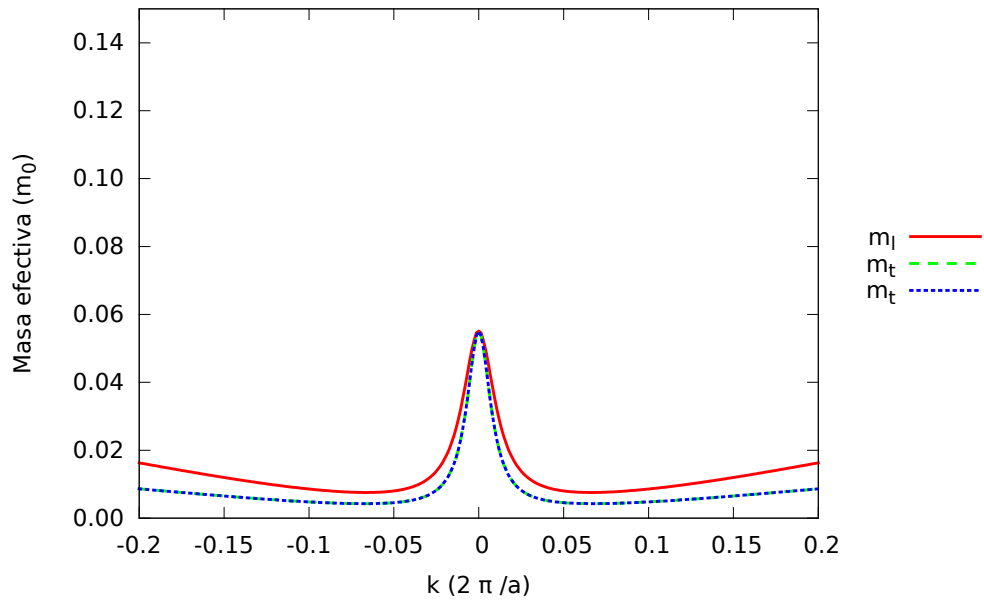


Figura 4.129: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje lambda banda 8

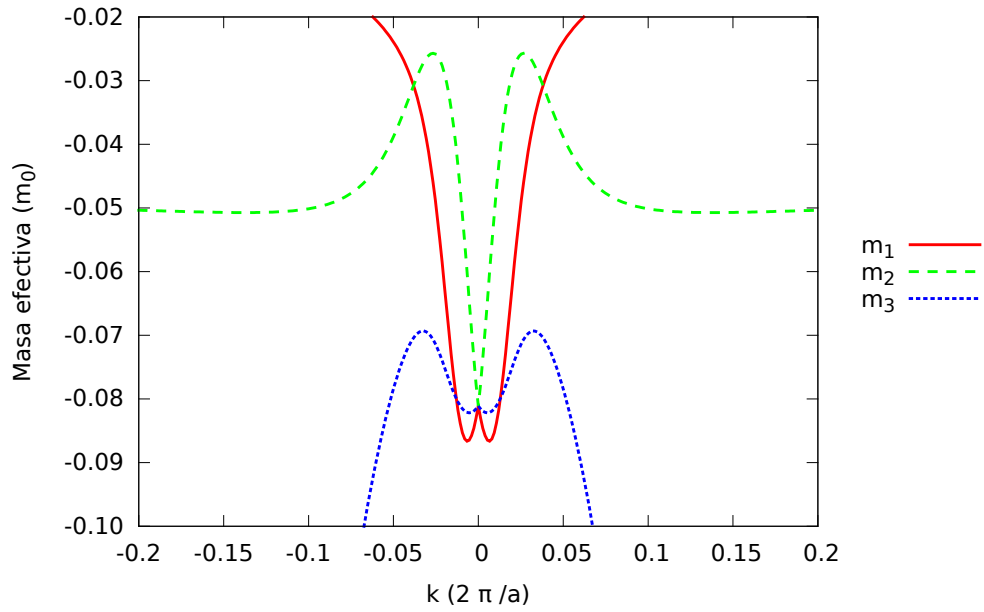


Figura 4.130: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 1

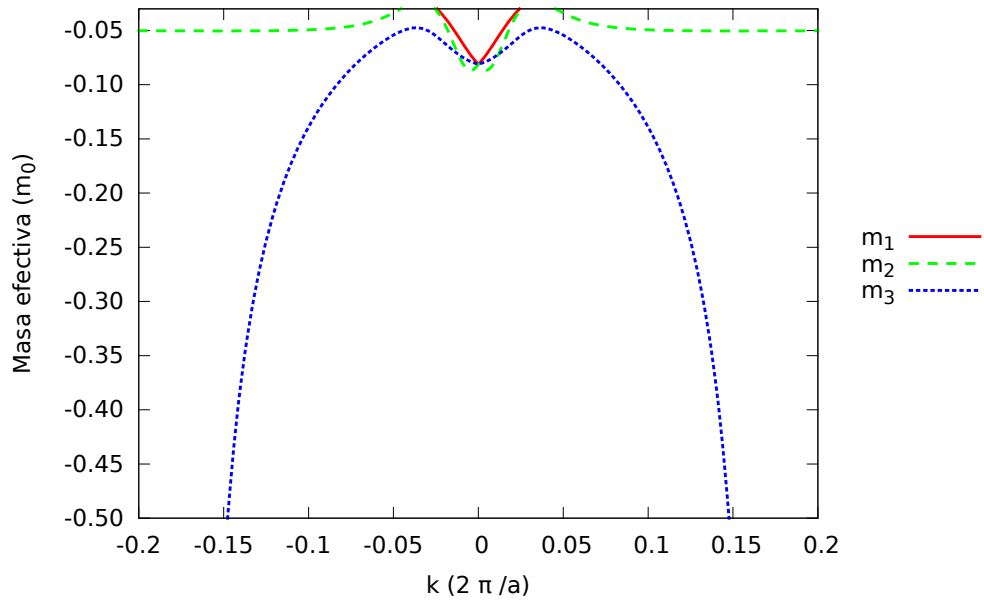
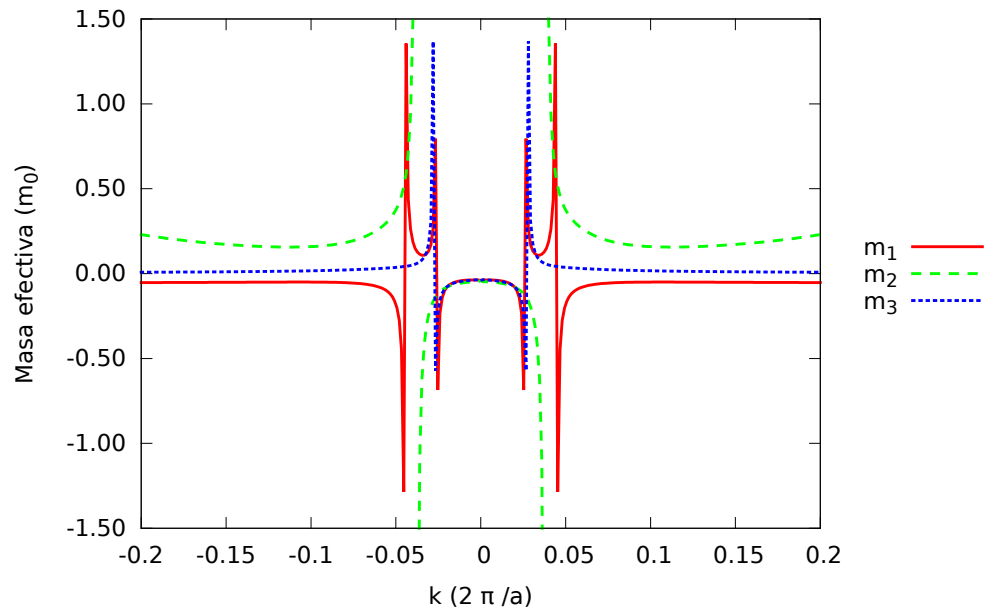
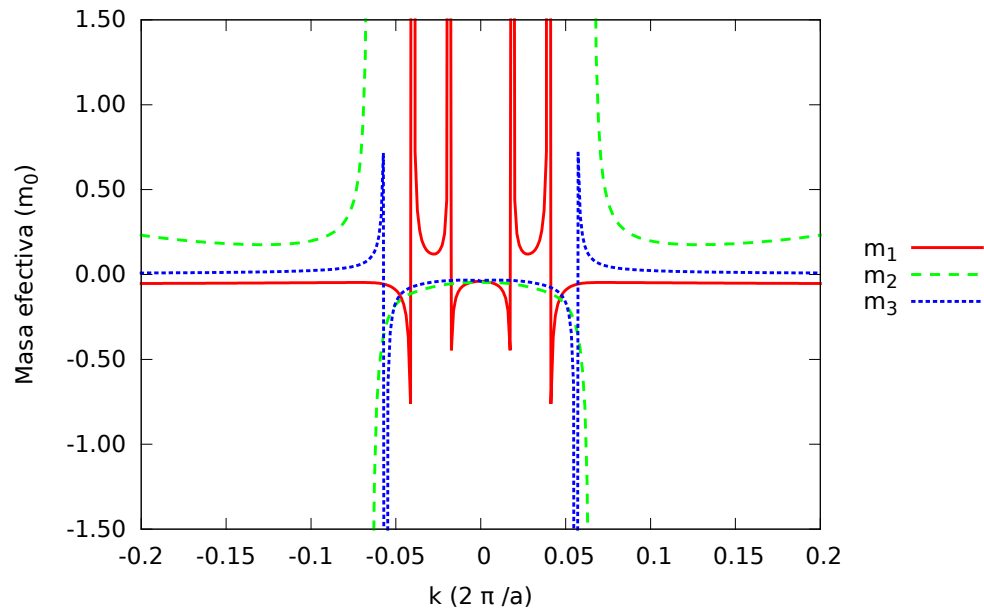


Figura 4.131: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 2

Figura 4.132: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 3Figura 4.133: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 4

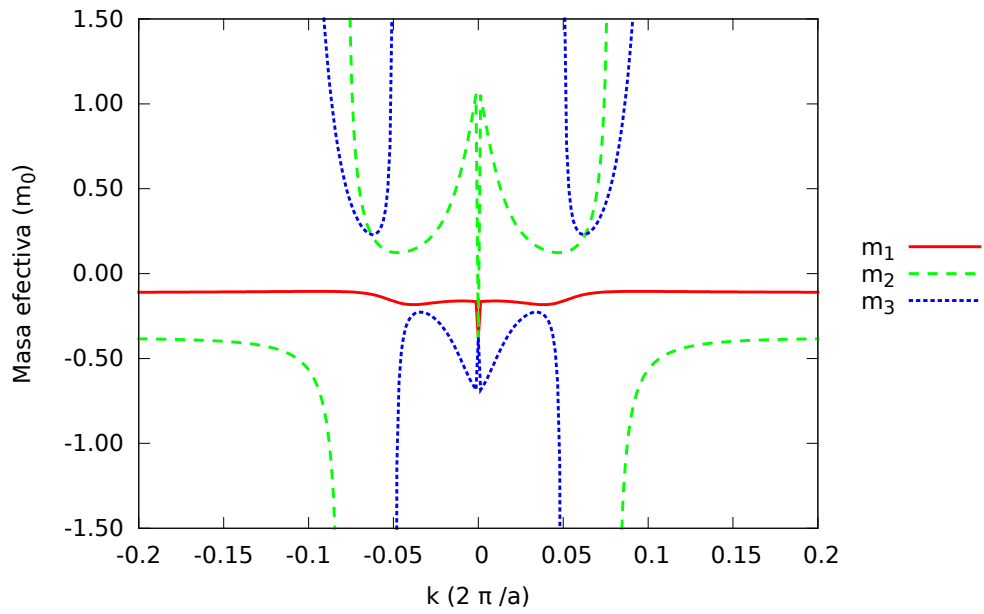


Figura 4.134: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 5

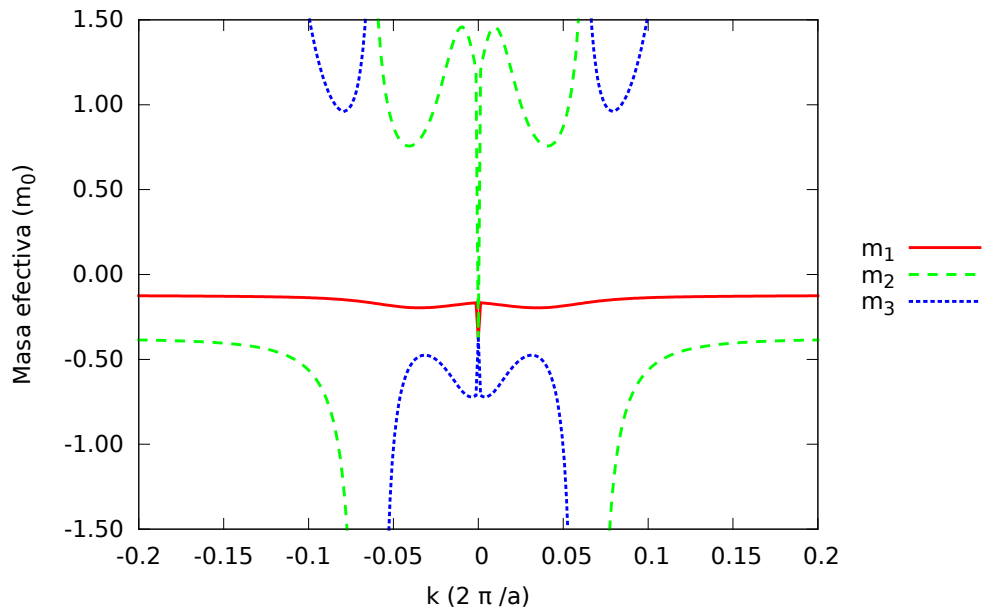
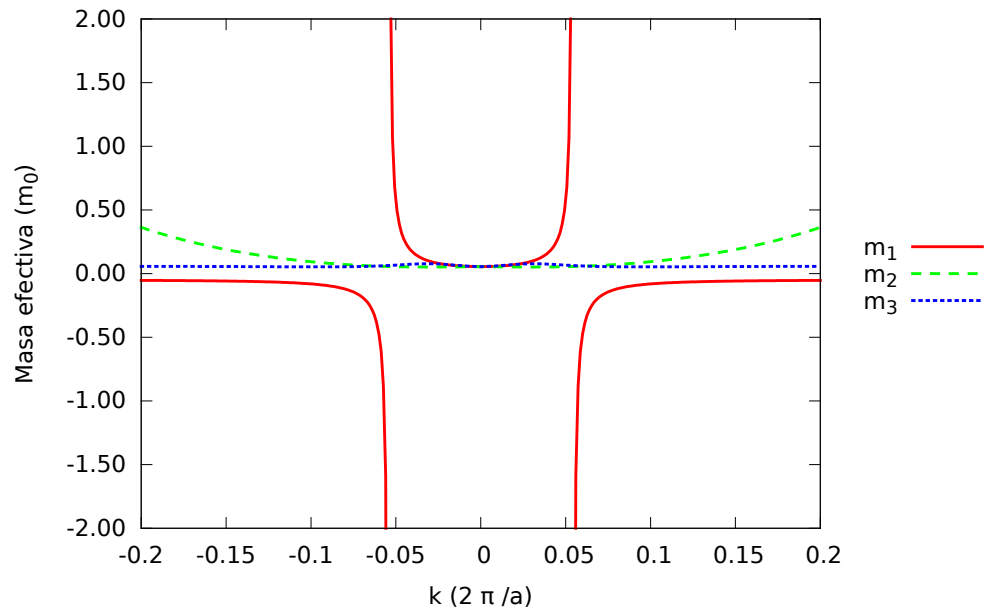
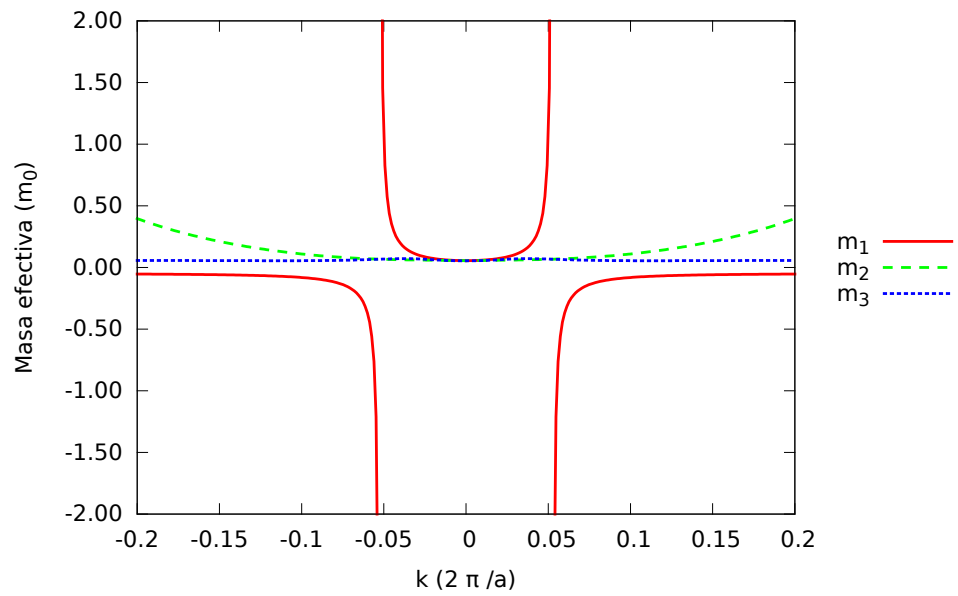


Figura 4.135: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 6

Figura 4.136: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 7Figura 4.137: $H_{8 \times 8}(k\pi)$ eje sigma banda 8

■ $H_{14 \times 14}$

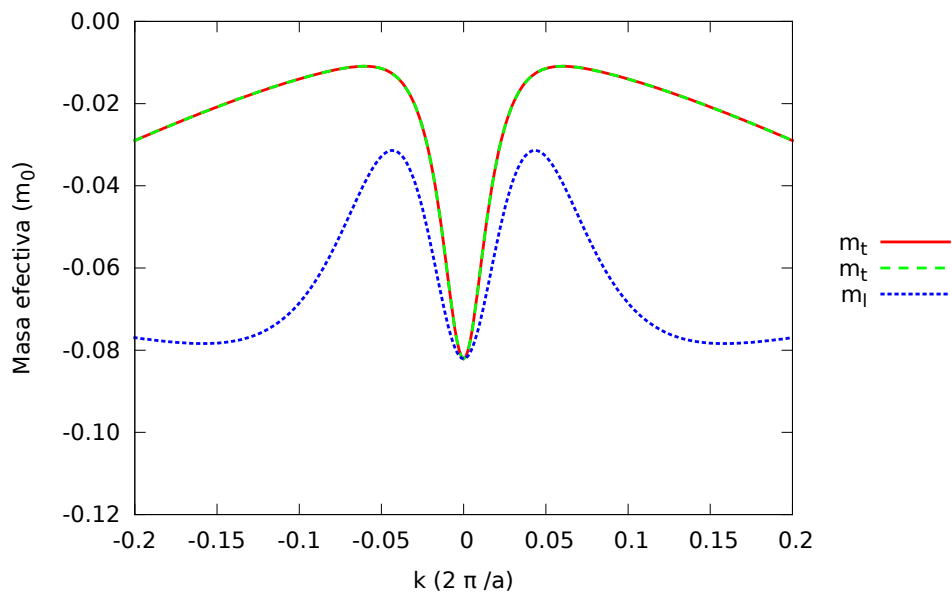


Figura 4.138: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 1

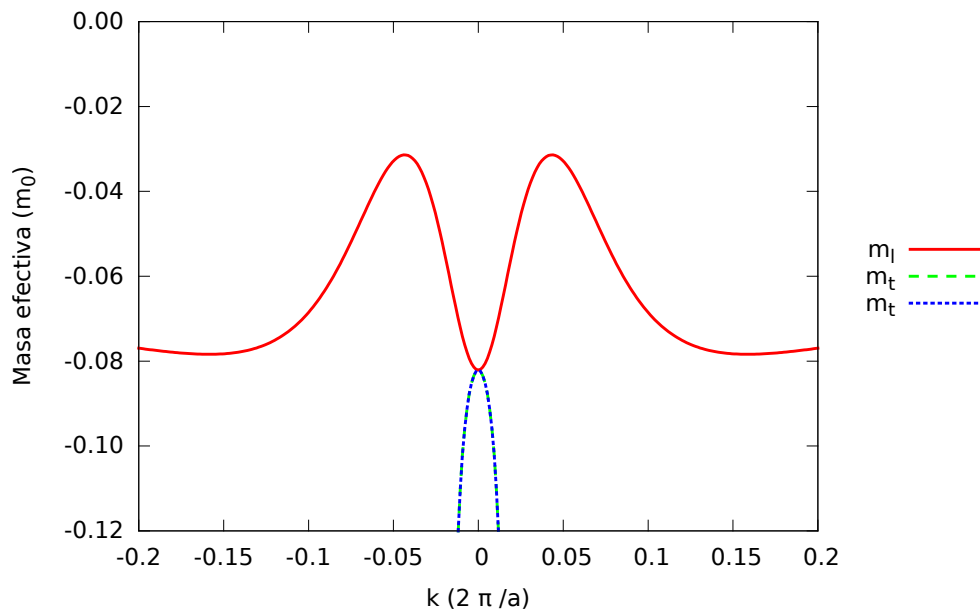


Figura 4.139: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 2

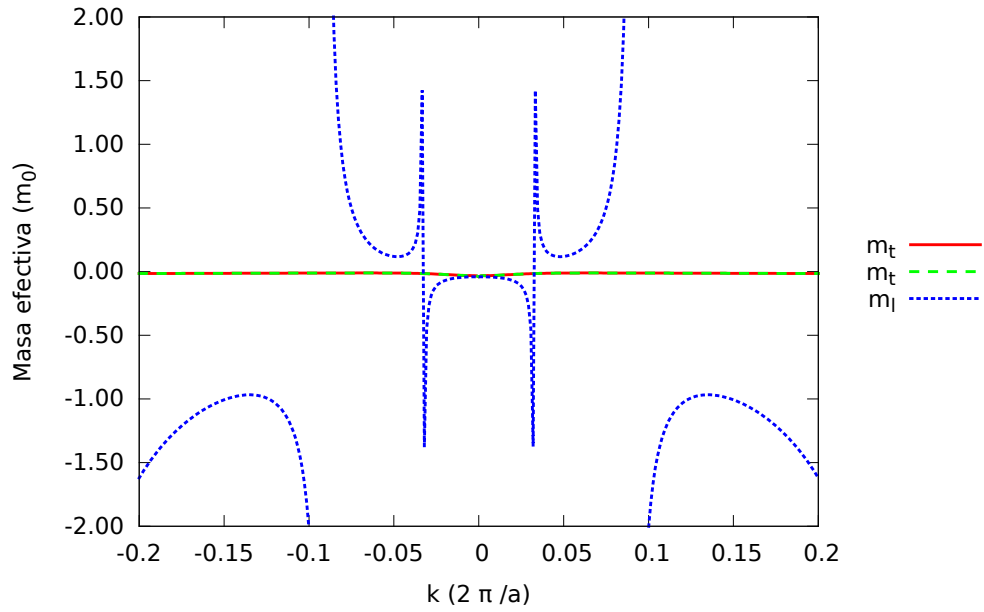


Figura 4.140: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 3

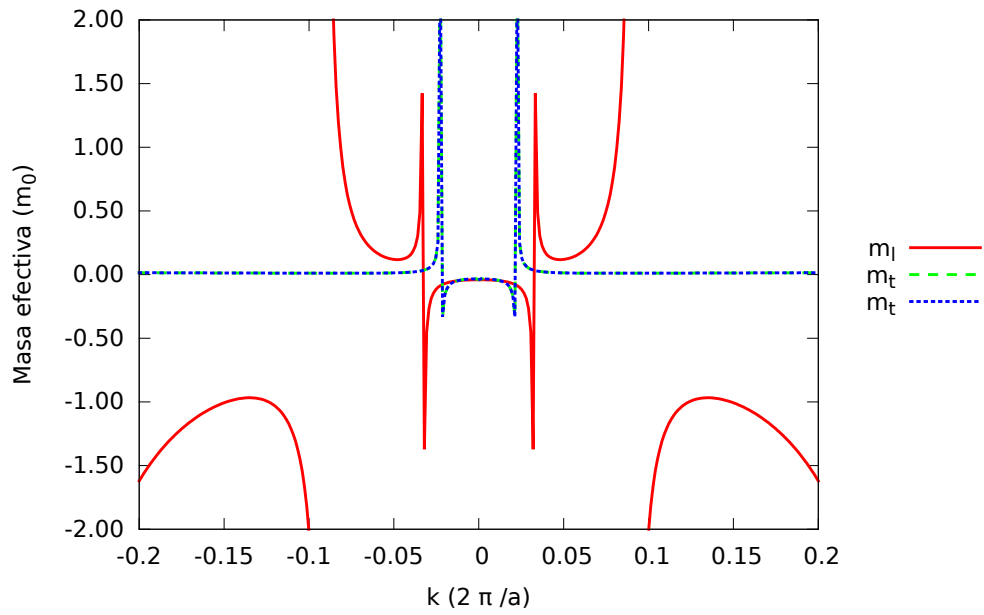


Figura 4.141: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 4

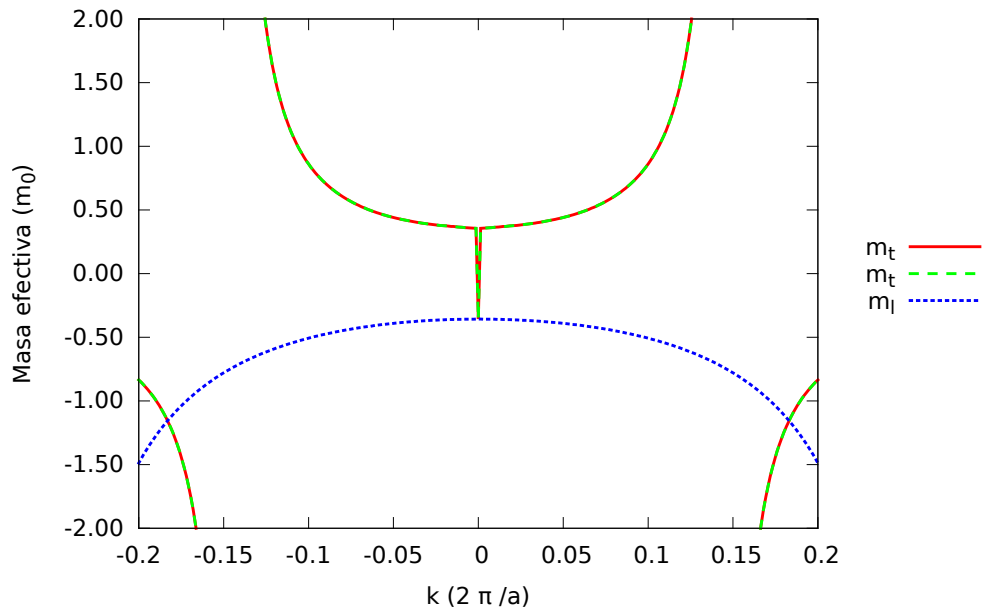


Figura 4.142: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 5

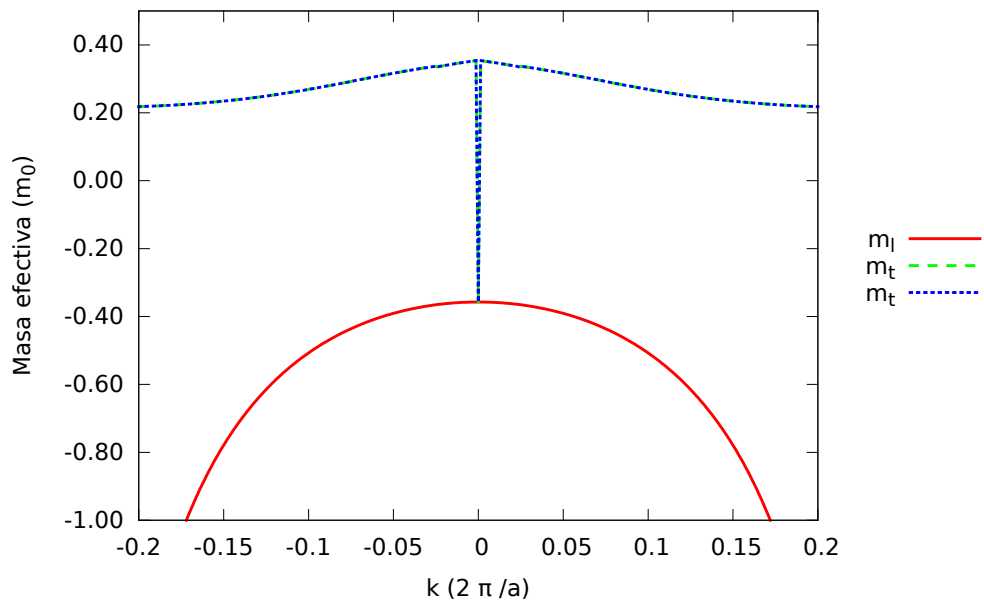


Figura 4.143: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 6

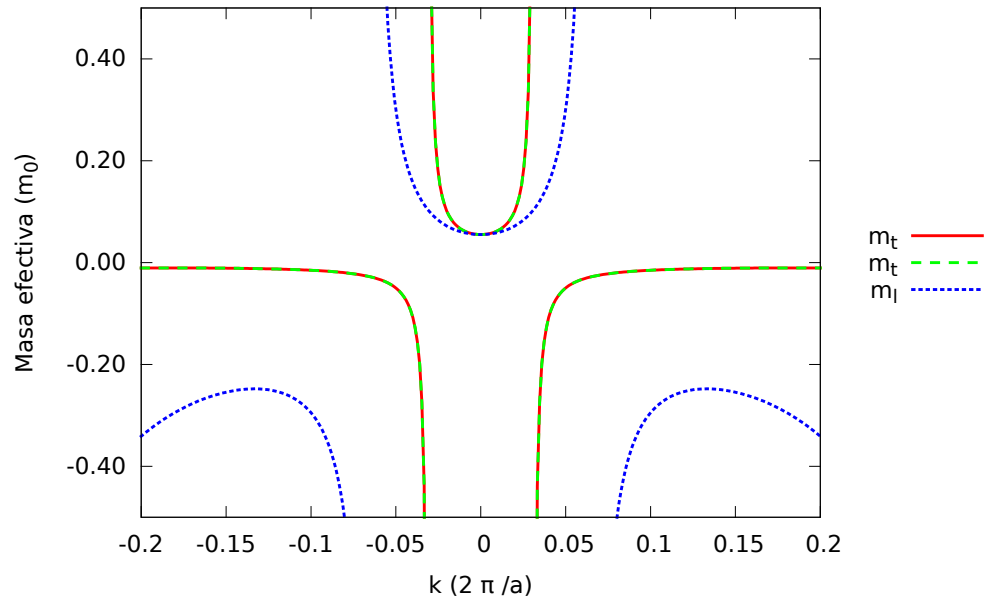


Figura 4.144: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 7

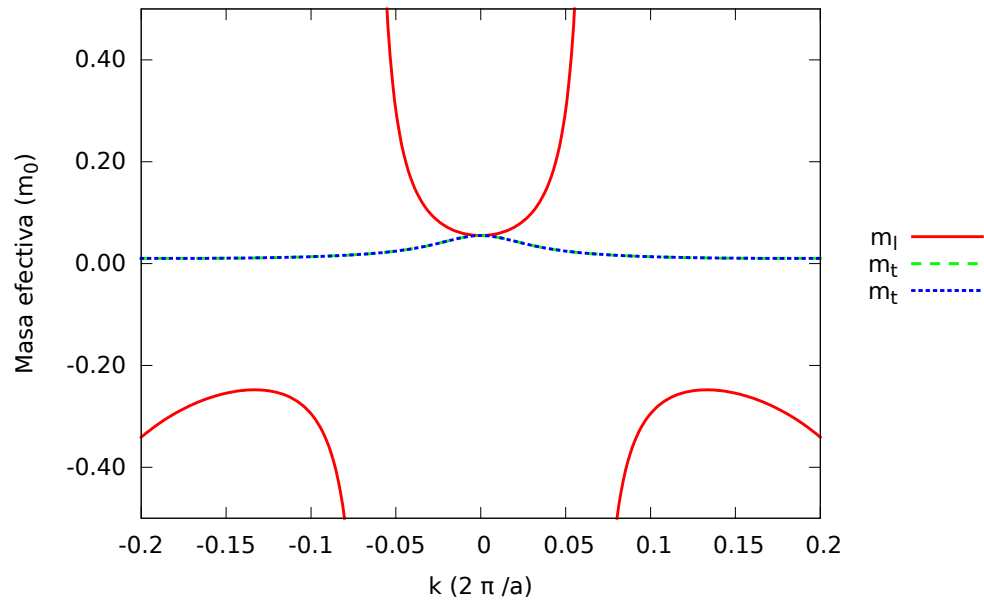


Figura 4.145: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 8

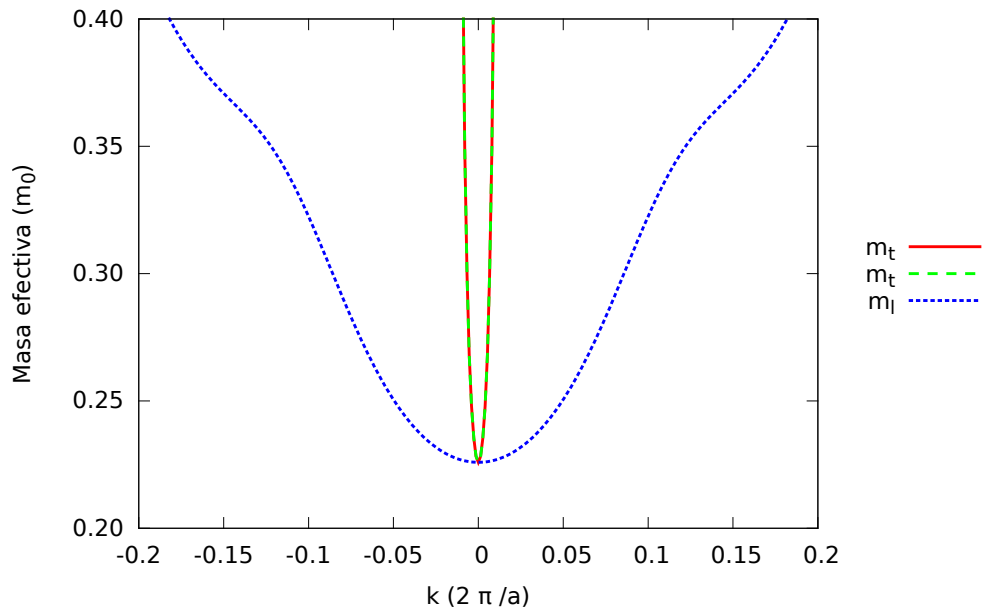


Figura 4.146: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 9

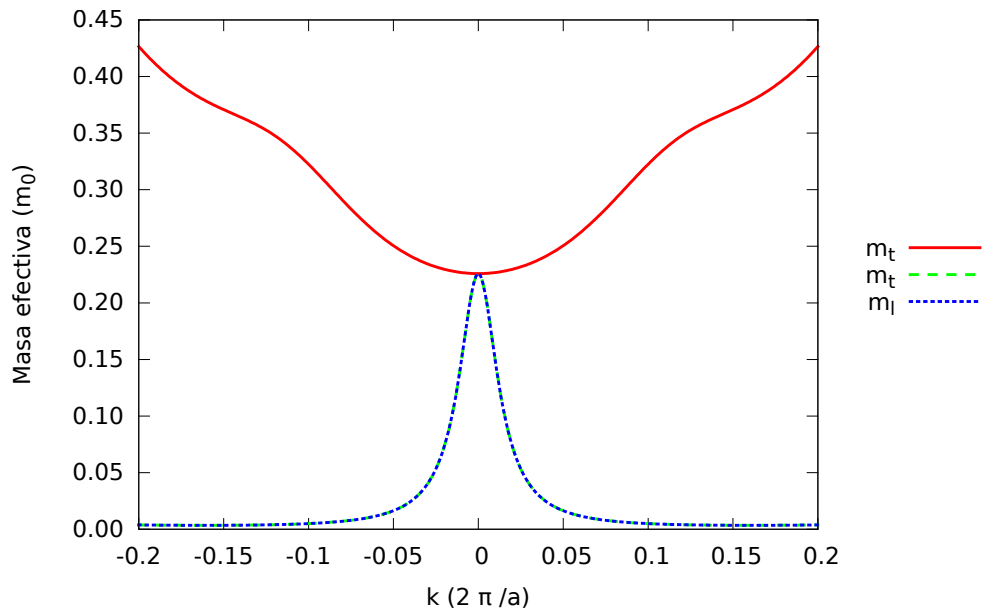


Figura 4.147: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 10

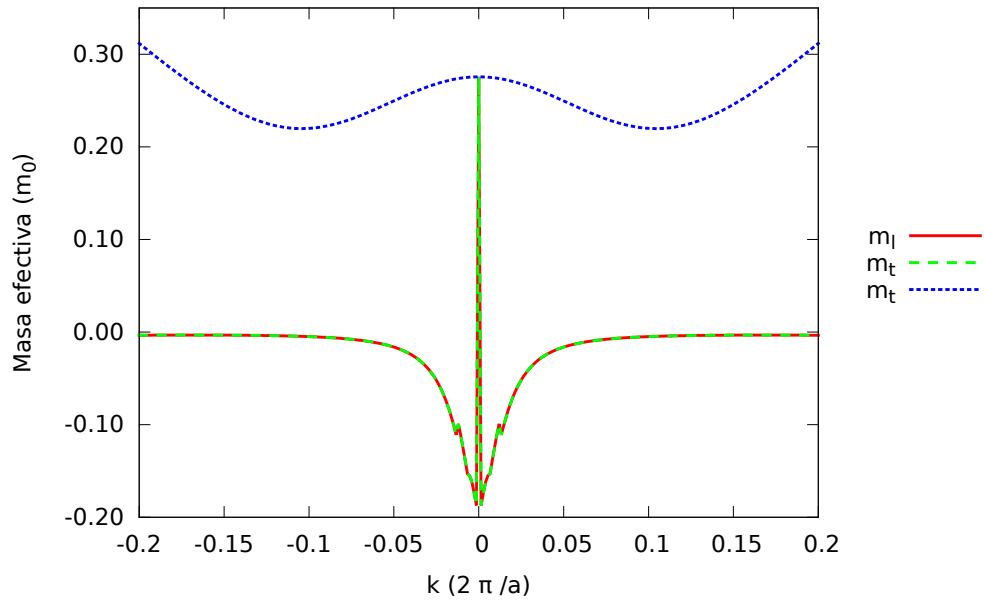


Figura 4.148: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 11

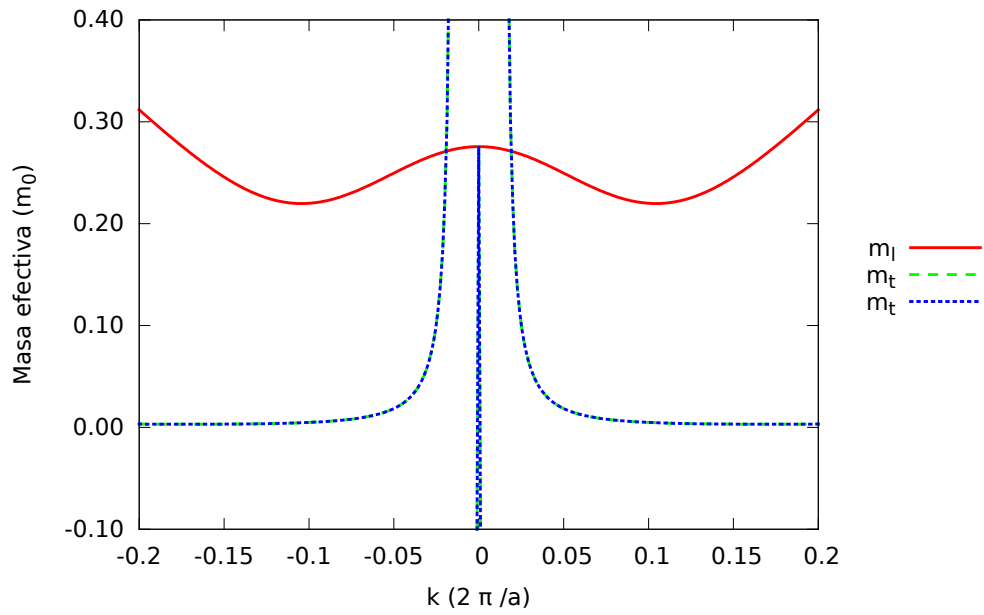


Figura 4.149: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 12

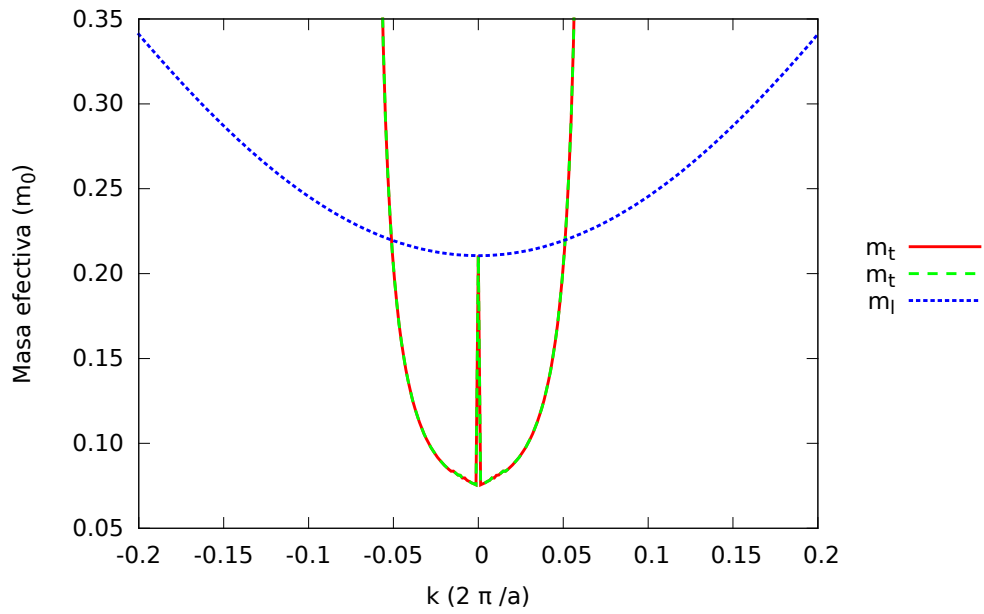


Figura 4.150: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 13

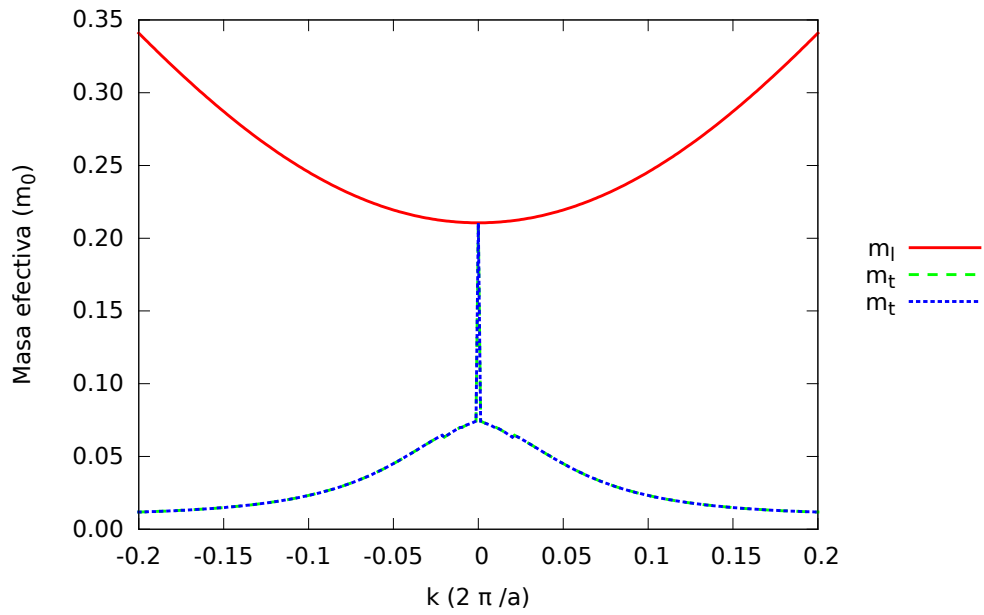


Figura 4.151: $H_{14 \times 14}$ eje $\Delta \vec{k} = (k, 0, 0)$ para la banda 14

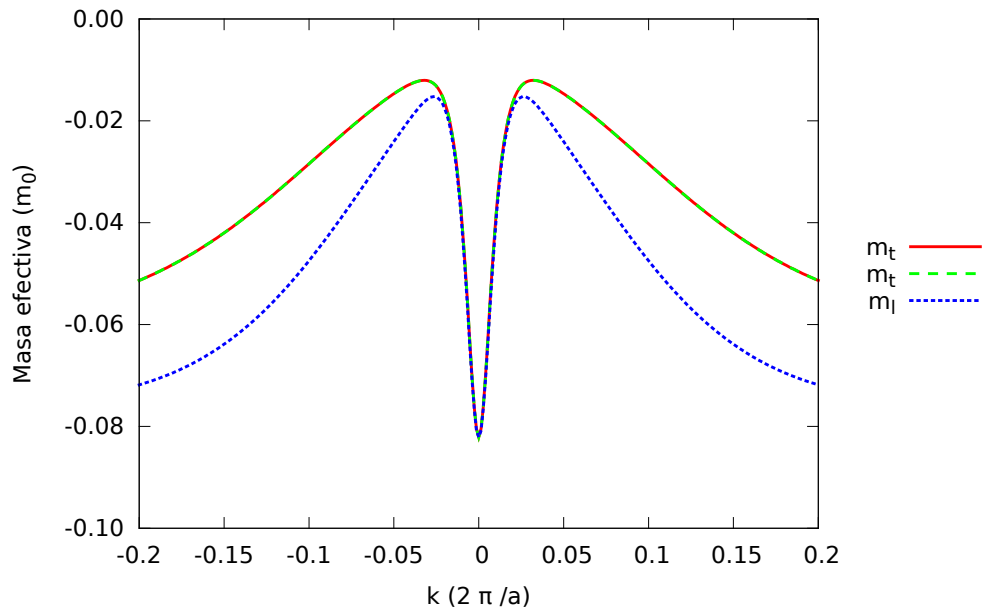


Figura 4.152: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 1

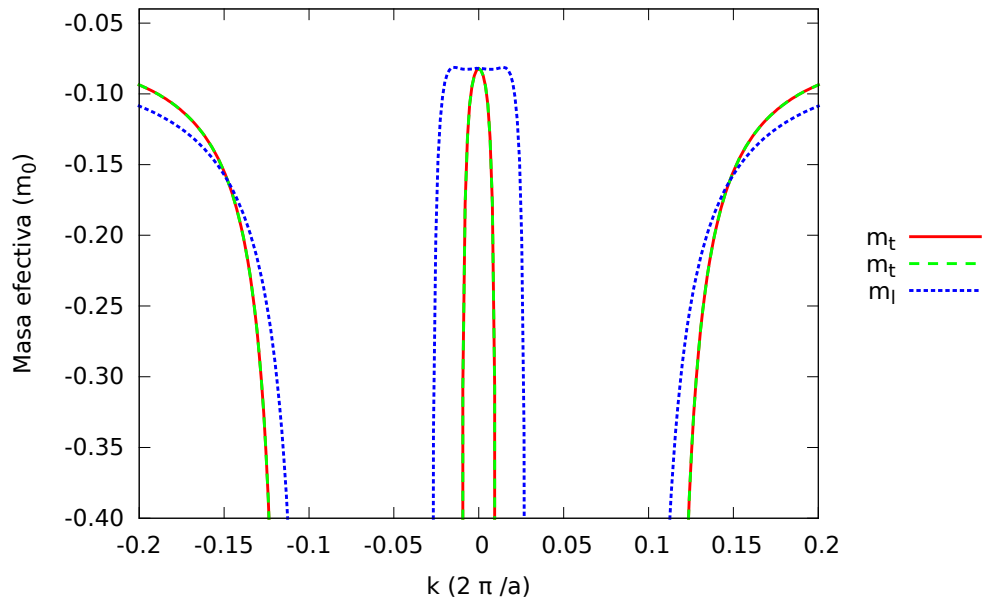


Figura 4.153: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 2

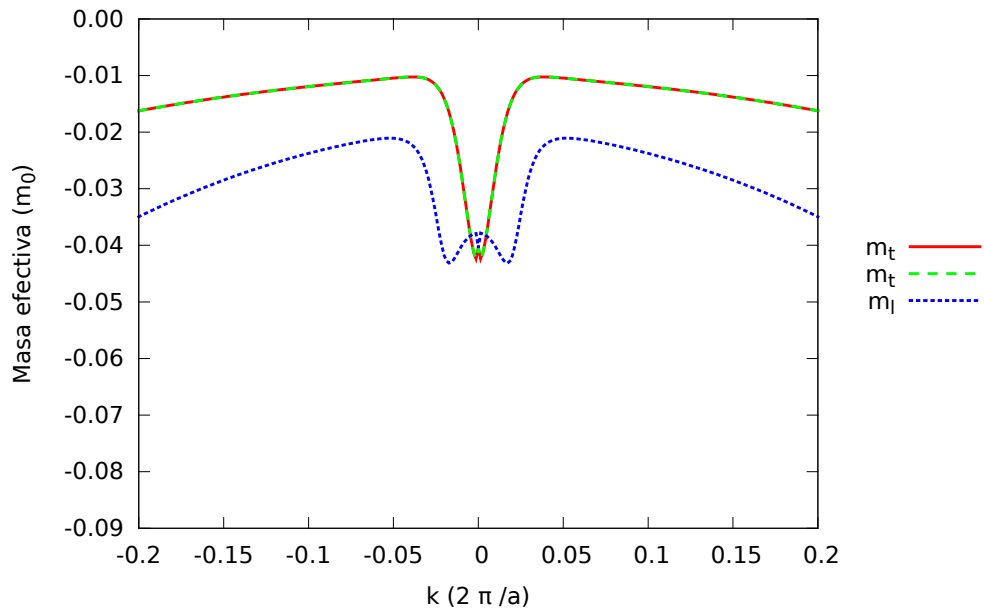


Figura 4.154: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 3

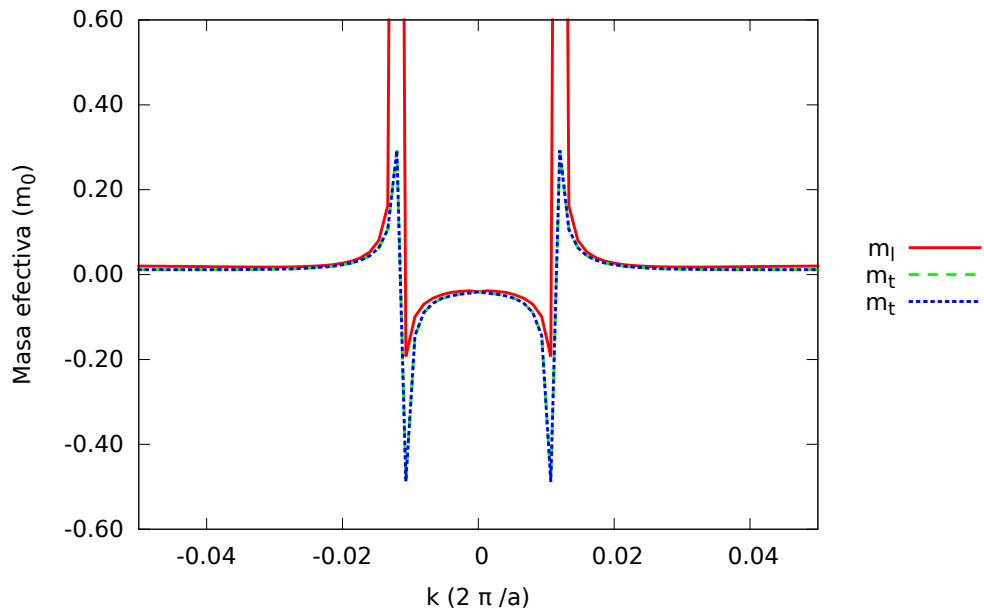


Figura 4.155: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 4

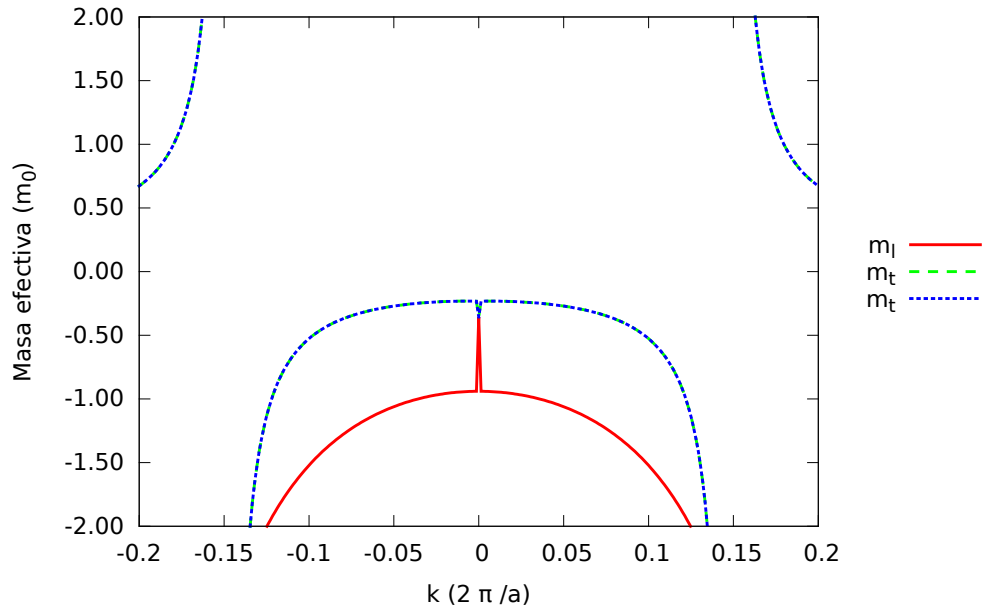


Figura 4.156: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 5

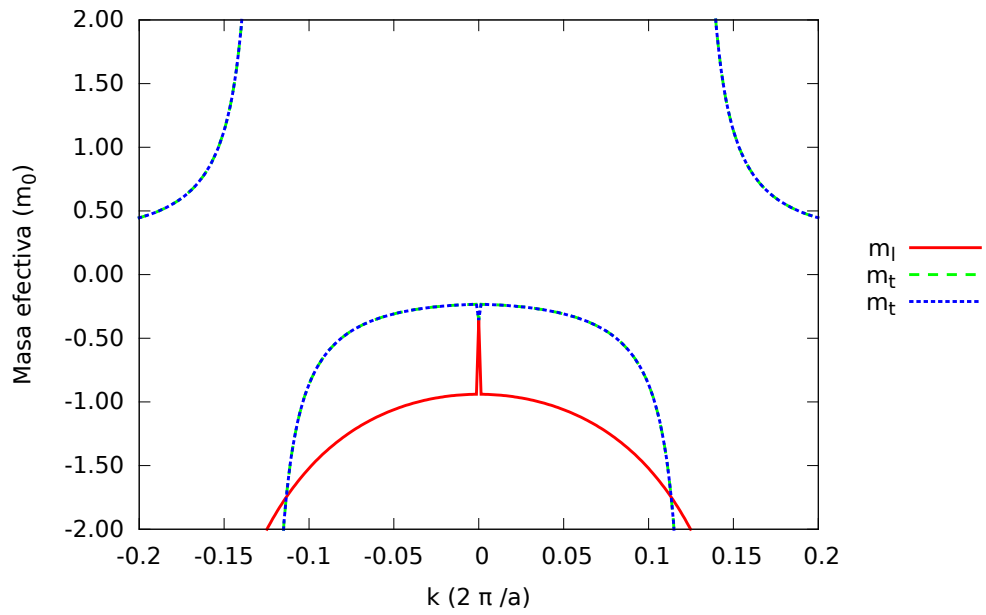


Figura 4.157: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 6

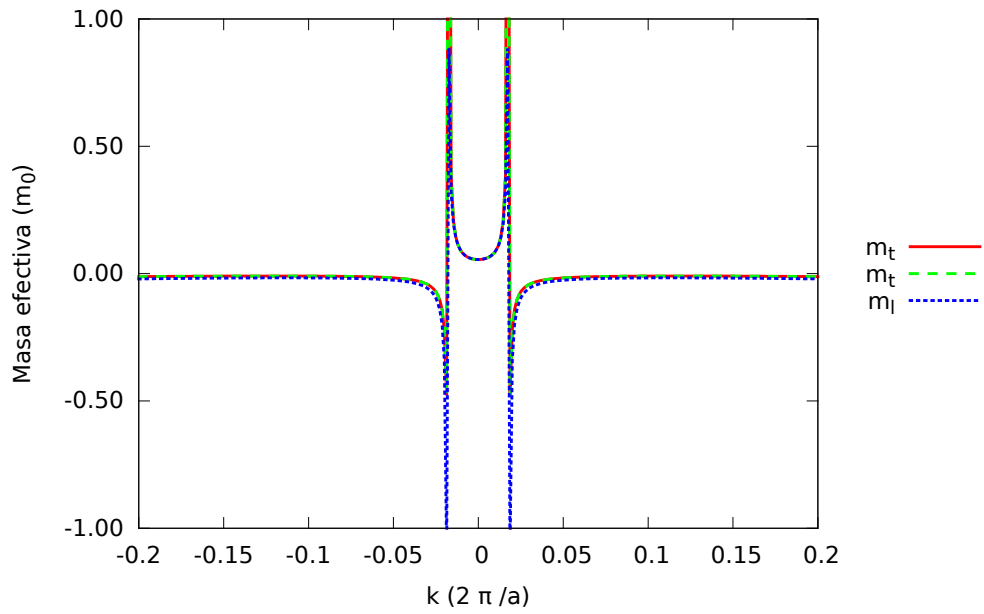


Figura 4.158: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 7

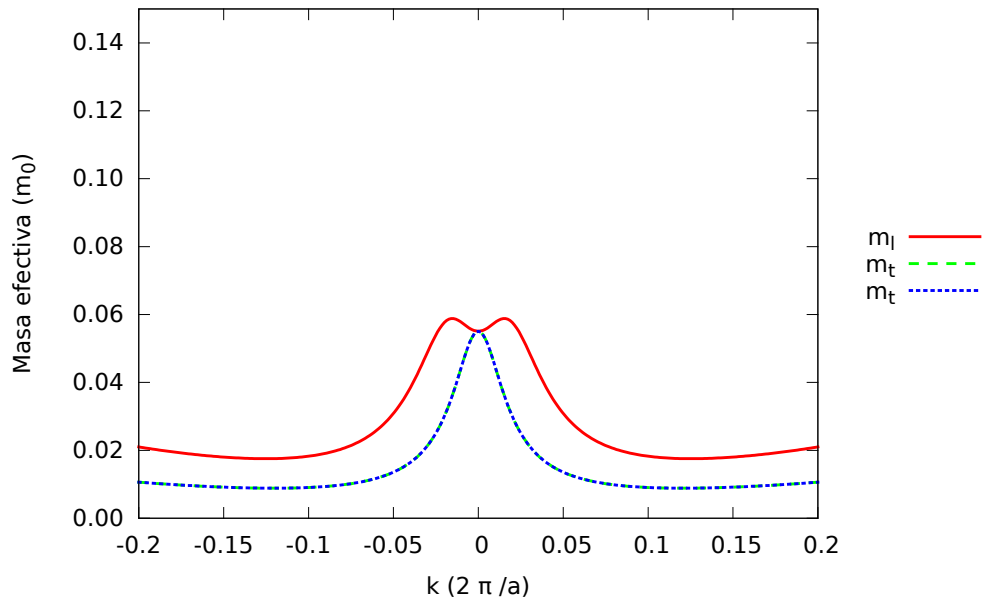


Figura 4.159: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 8

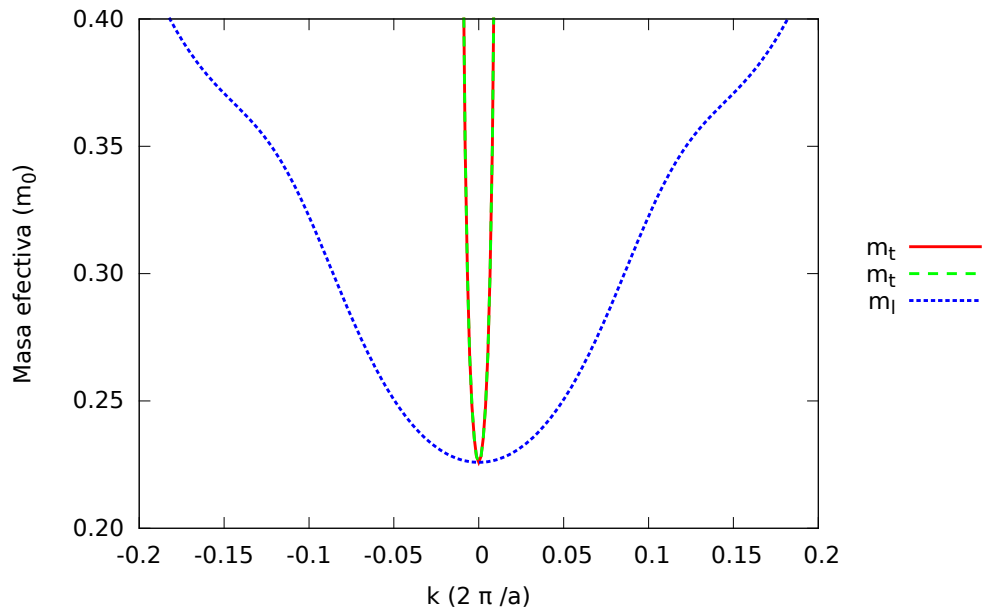


Figura 4.160: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 9

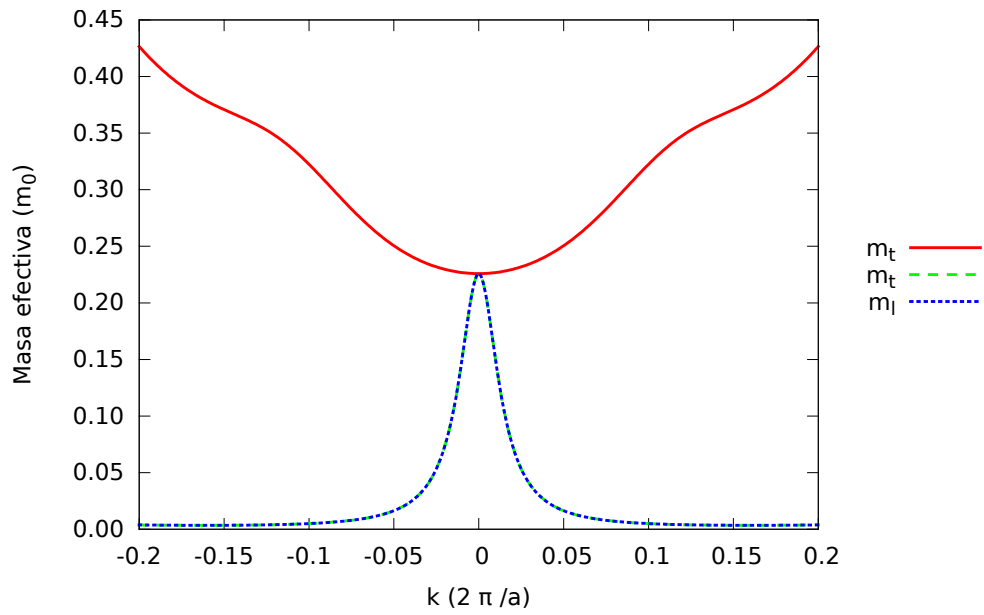


Figura 4.161: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 10

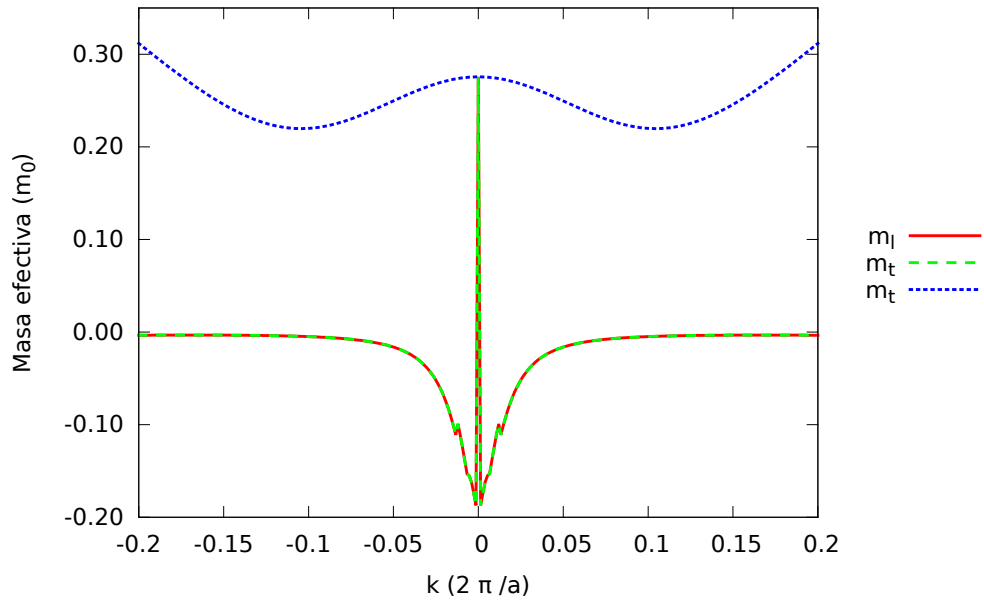


Figura 4.162: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 11

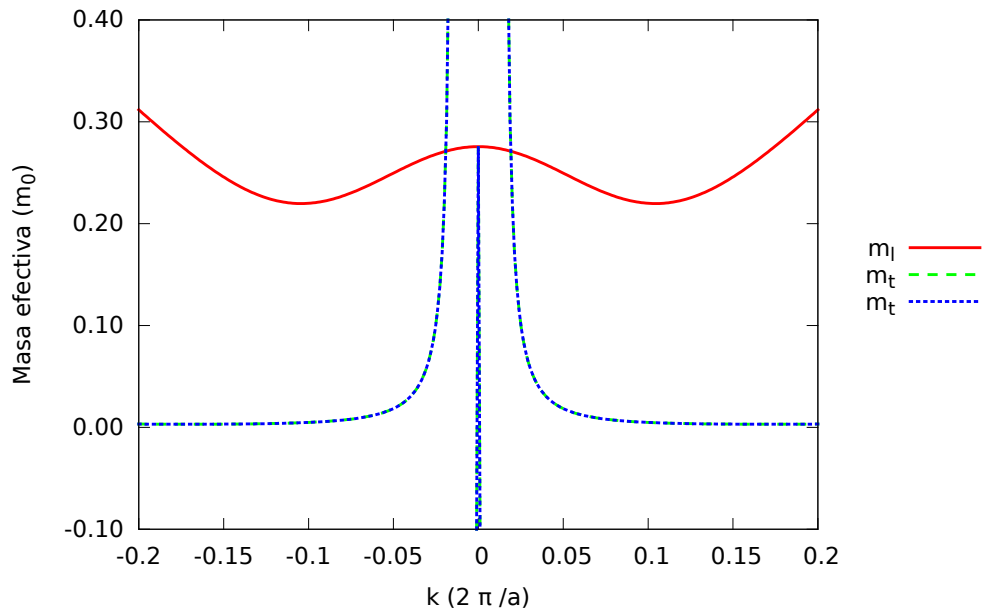


Figura 4.163: $H_{14 \times 14}$ eje Λ $\vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 12

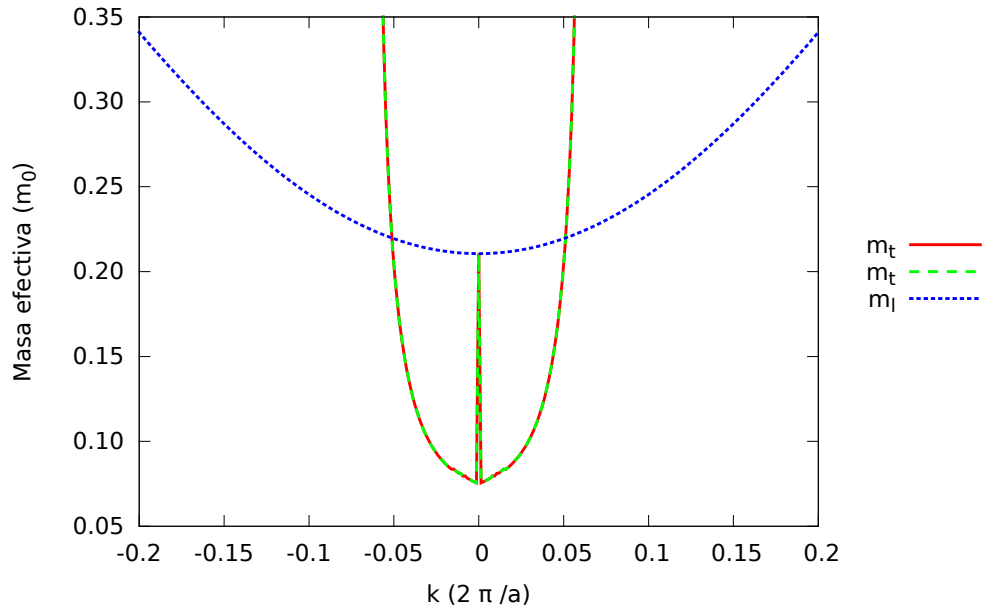


Figura 4.164: $H_{14 \times 14}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 13

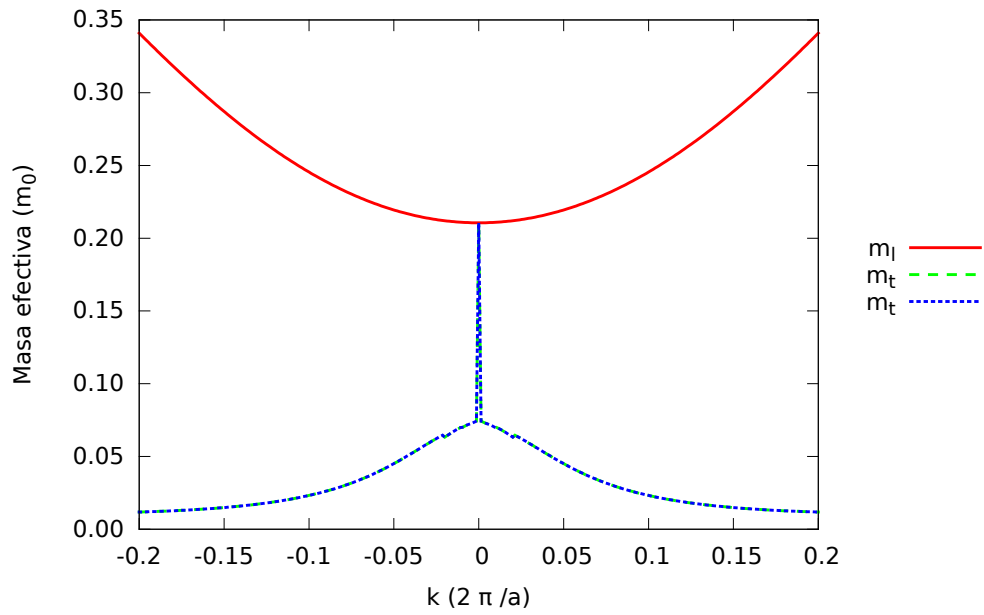


Figura 4.165: $H_{14 \times 14}$ eje $\Lambda \vec{k} = (k, k, k)$ para la banda 14

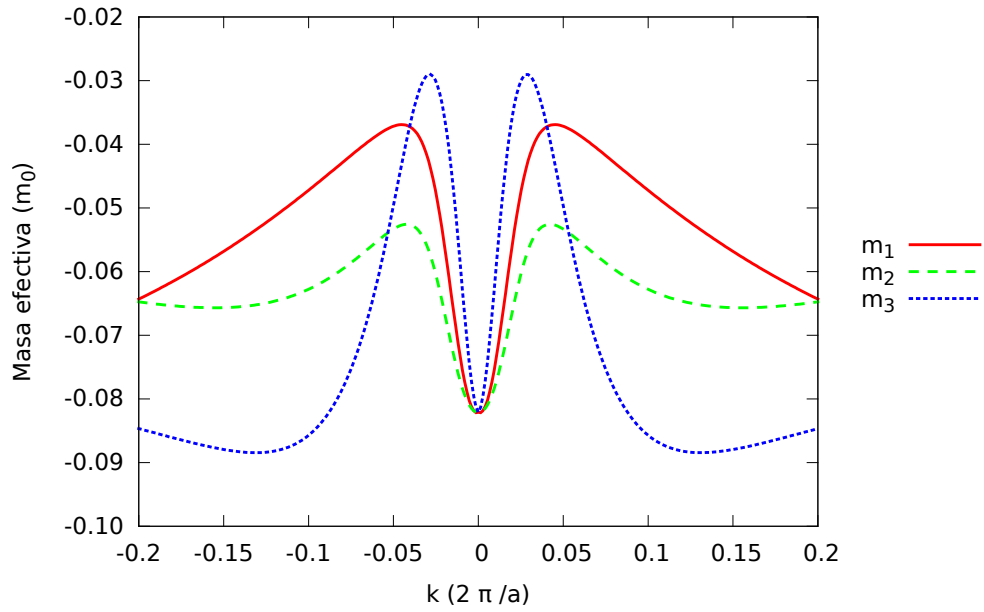


Figura 4.166: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 1

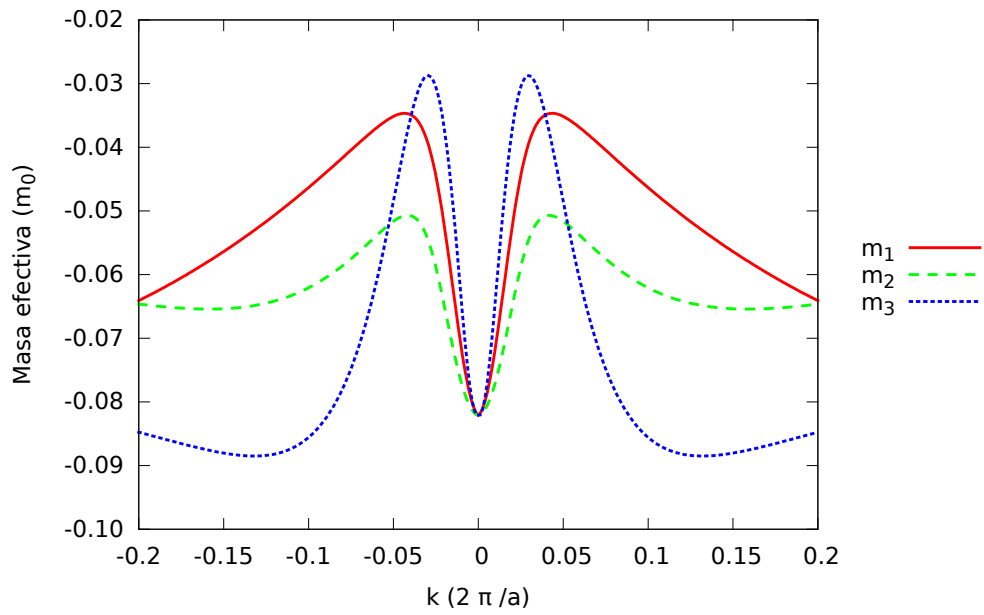


Figura 4.167: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 2

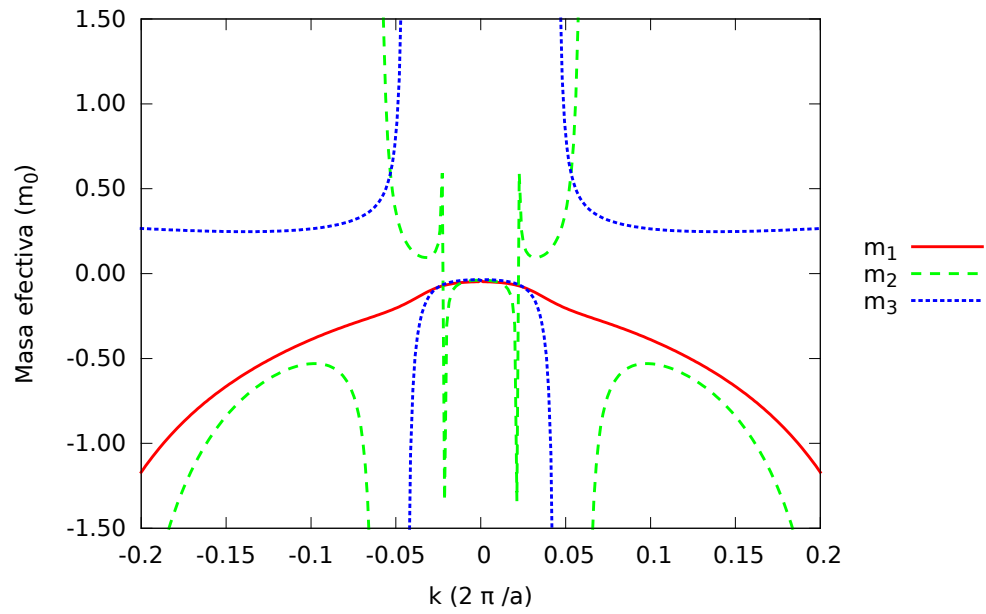


Figura 4.168: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 3

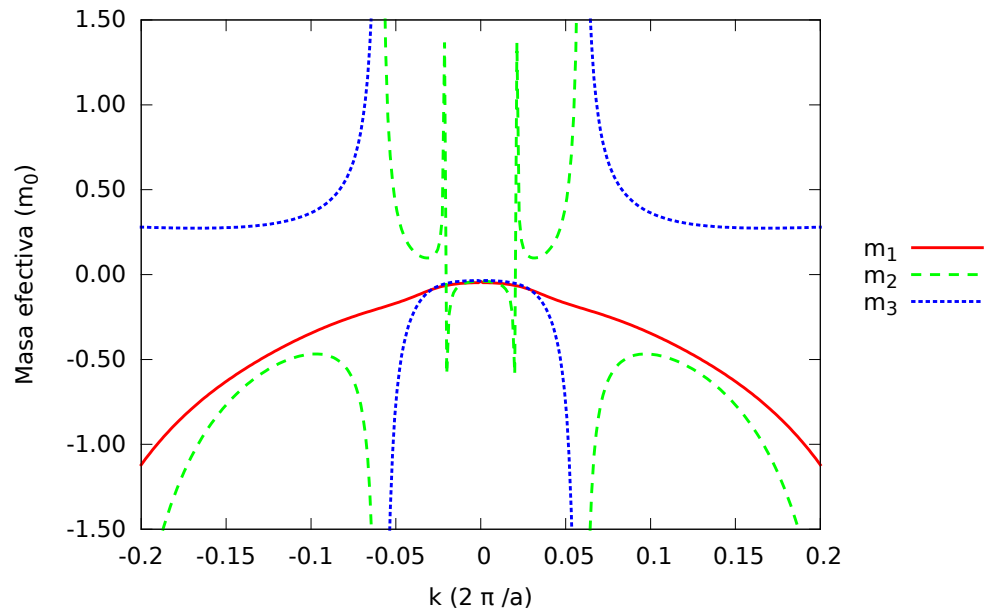


Figura 4.169: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 4

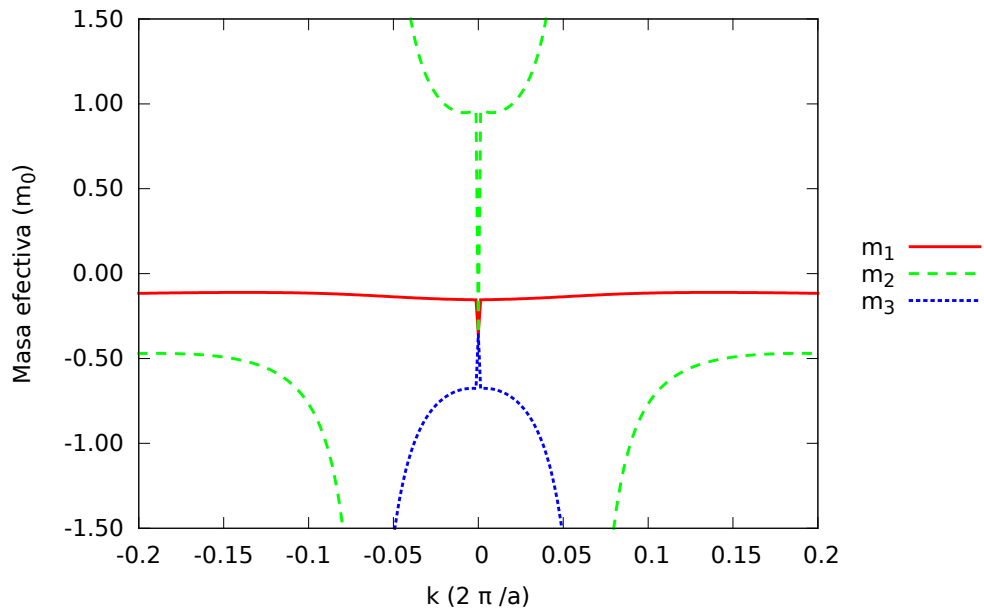


Figura 4.170: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 5

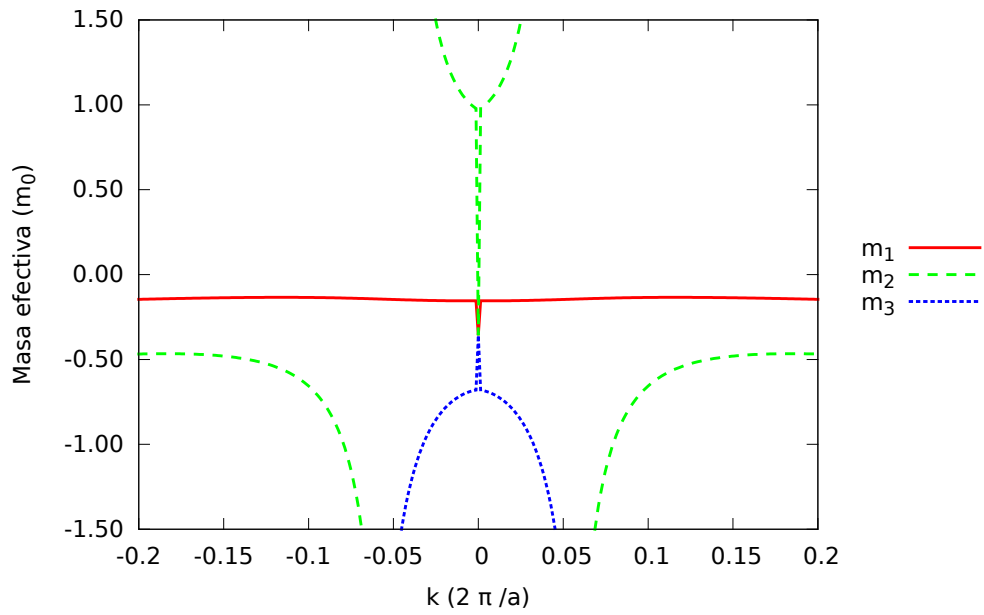


Figura 4.171: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 6

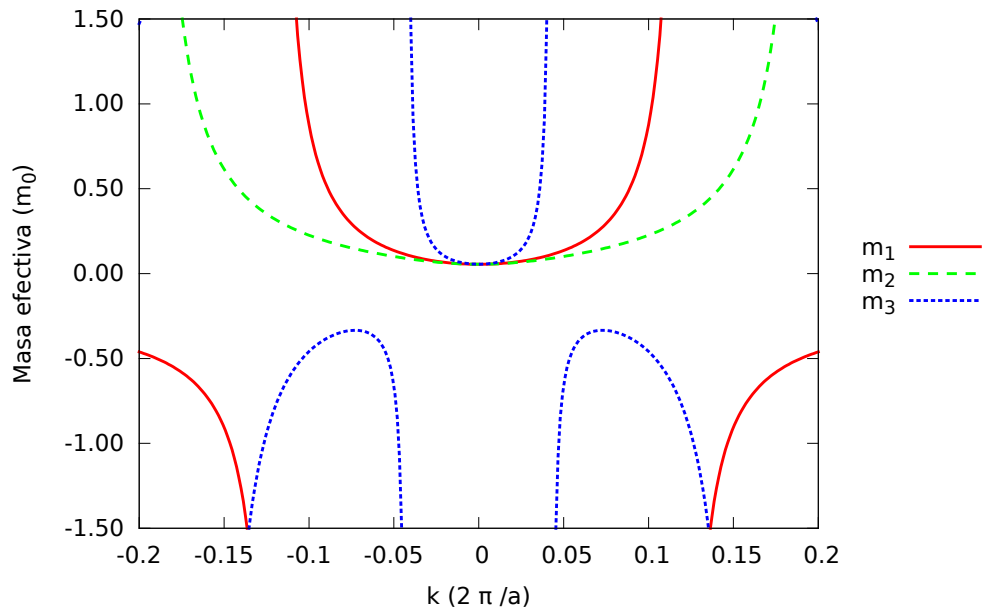


Figura 4.172: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 7

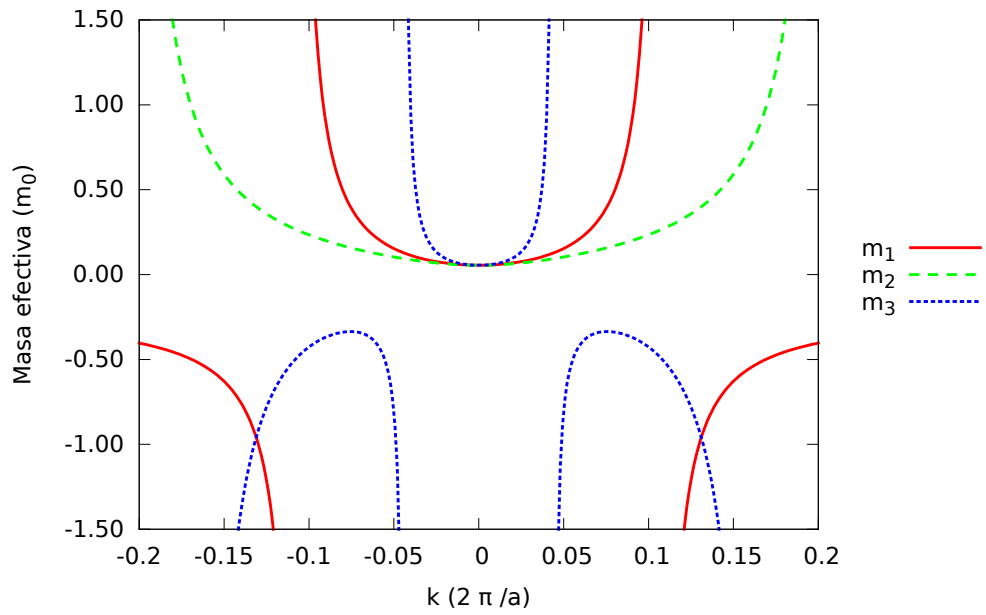


Figura 4.173: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 8

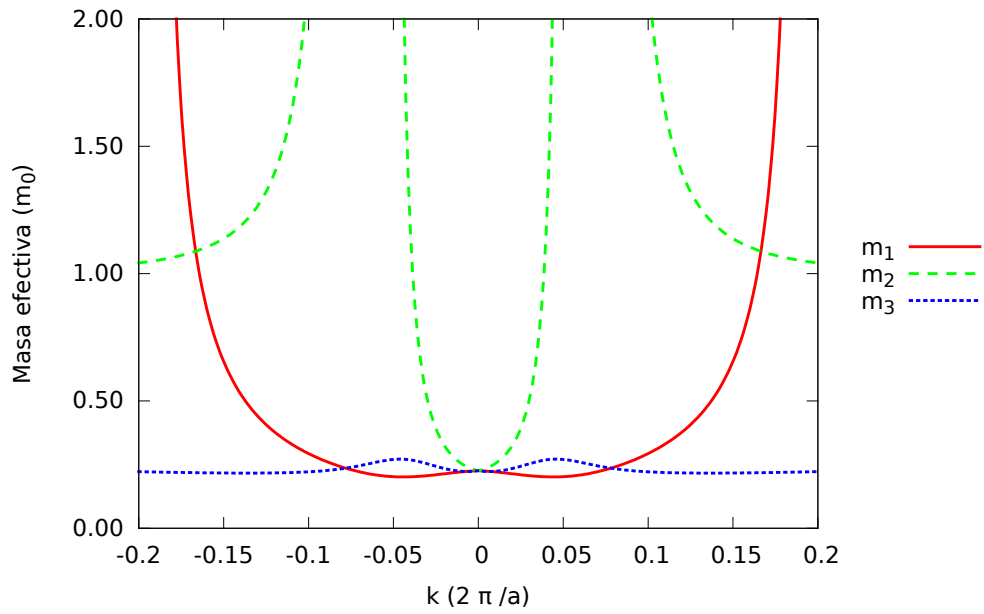


Figura 4.174: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 9

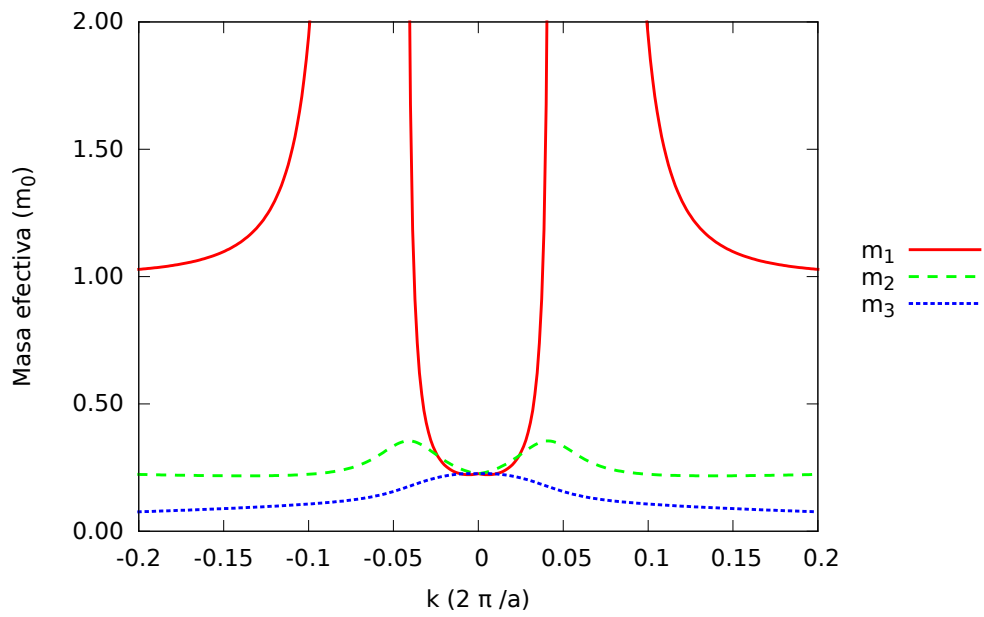


Figura 4.175: $H_{14 \times 14}$ eje Σ $\vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 10

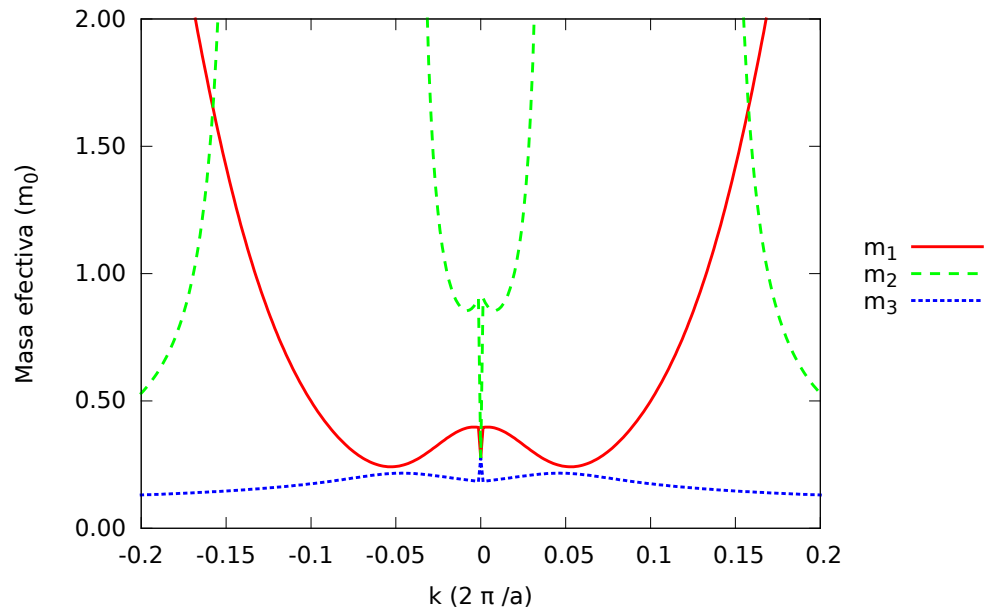


Figura 4.176: $H_{14 \times 14}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 11

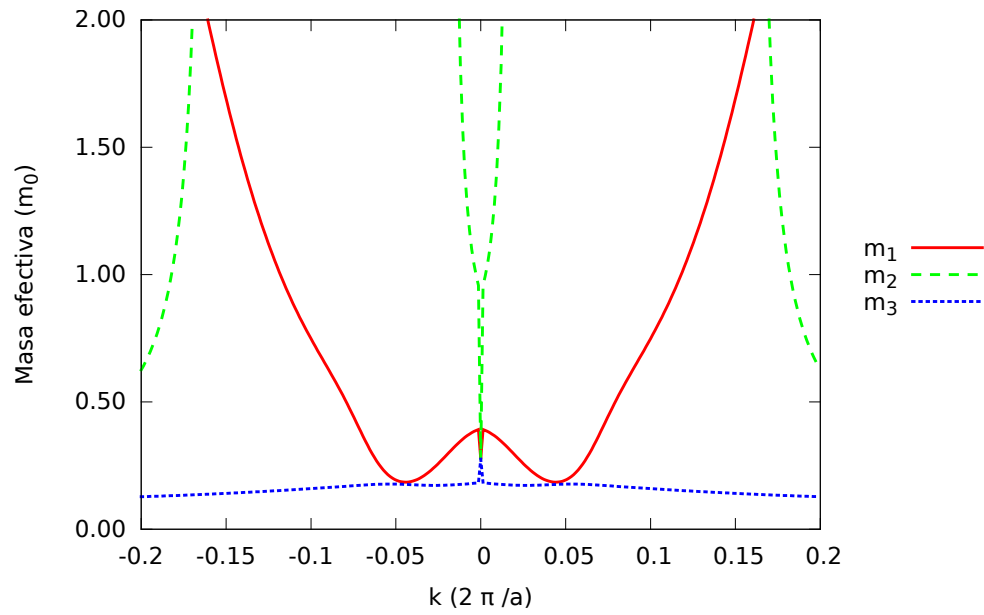


Figura 4.177: $H_{14 \times 14}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 12

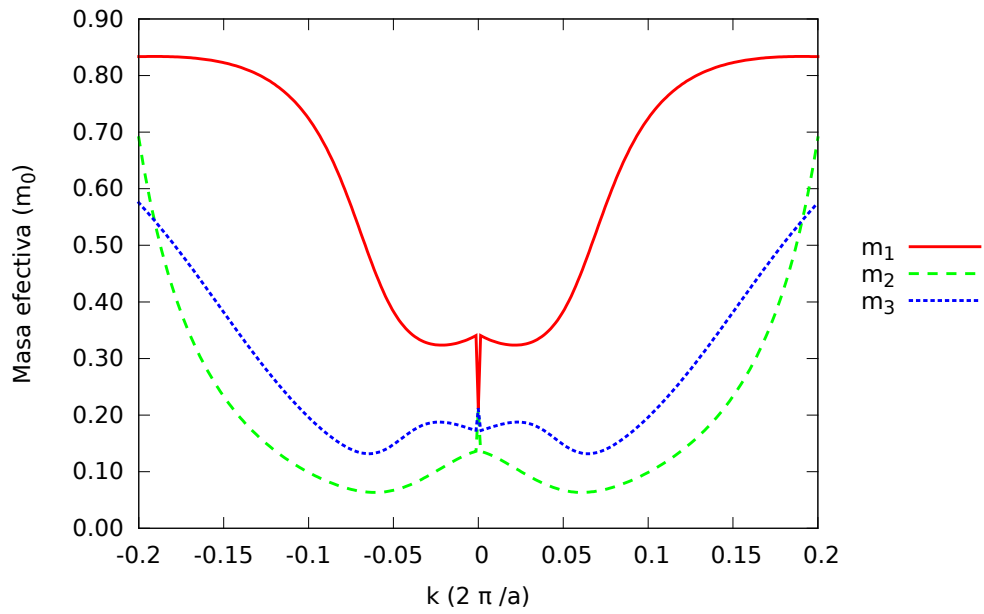


Figura 4.178: $H_{14 \times 14}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 13

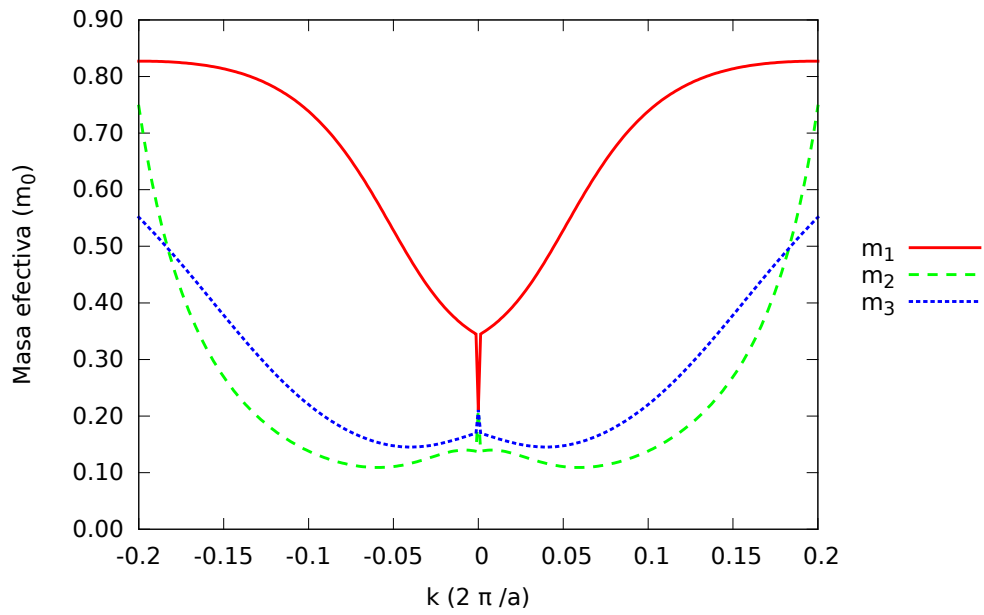


Figura 4.179: $H_{14 \times 14}$ eje $\Sigma \vec{k} = (k, k, 0)$ para la banda 14

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado la aplicación del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ al Arseniuro de Galio (GaAs) obteniéndose resultados de bandas de energía, superficies isoenergéticas y masas efectivas.

Las bandas de energía obtenidas, reproducen bastante bien las bandas del (GaAs) pero solamente para valores de \vec{k} pequeños. Al alejarse del punto Γ el valor de \vec{k} crece haciendo que la contribución del término $\vec{k} \cdot \vec{p}$ sea cada vez más grande hasta llegar al punto en el que tratarlo como una perturbación ya no es adecuado. No obstante, los resultados obtenidos para valores pequeños de k son bastante satisfactorios.

Las bandas de orbitales tipo p_i tanto para $H_{4 \times 4}$ como para $H_{7 \times 7}$ para los ejes Δ y Λ se presentan en una banda no degenerada más dos bandas degeneradas, esto es debido a que si se hace un cambio de coordenadas de modo que se tenga un eje paralelo y dos perpendiculares, los dos últimos pueden hacerse coincidir por medio de operaciones de simetría y por lo tanto son equivalentes. No ocurre a lo largo del eje Σ ya que los ejes perpendiculares no son transformables por operaciones de simetría y en consecuencia se obtienen tres bandas distintas. El mismo argumento sirve para explicar las degeneraciones en las bandas para $H_{8 \times 8}, H_{8 \times 8(kpi)}, H_{14 \times 14}$ en los ejes Δ y Λ .

La banda de tipo ${}^2S_{\frac{1}{2}}$ aparece degenerada con degeneración 2 como cabía esperar ya que el hamiltoniano no tiene dependencia con S_z .

Tal y como cabía esperar, y como se observa en las figuras 4.7-4.15, la interacción espín-órbita separa los estados tipo p_i subiendo los correspondientes a $J = \frac{3}{2}$ y bajando los de $J = \frac{1}{2}$.

The ${}^2S_{\frac{1}{2}}$ -type band appears twice-degenerated as it should since the hamiltonian does not depend of the component of spin along z axis.

Los resultados obtenidos para las masas efectivas en el punto Γ se corresponden bastante bien con los valores experimentales:

m^*/m_0	Valor Experimental	Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$
m_e	0.067	0.055
m_{lh}	-0.08	-0.03
m_{hh}	-0.53	-0.38
m_{so}	-0.154	-0.081

Cuadro 5.1: Comparación entre valores teóricos y experimentales de masas efectivas en el punto Γ . Los valores experimentales se han tomado de [1].

En el cuadro 8 m_{so} hace referencia a la masa de los huecos que se obtienen al tener en cuenta la interacción espín-órbita.

Los resultados, a pesar de no reproducir exactamente los valores experimentales, son bastante buenos.

Comparando los valores de masas efectivas obtenidos para las distintas bases y hamiltonianos considerados, se observa que los resultados son muy consistentes ya que se obtienen valores muy parecidos. Por ejemplo, las masas de de las bandas comunes de $H_{4 \times 4}$ y $H_{7 \times 7}$, $(p_1^v, p_2^v, p_3^v, s^c)$, son muy parecidas. Lo mismo ocurre con las masas de las bandas comunes de $H_{8 \times 8}$, $H_{8 \times 8(kpi)}$ y $H_{14 \times 14}$, que serían las 8 primeras. Asimismo, el valor de masa efectiva que se obtiene para la banda s^c ó ${}^2S_{\frac{1}{2}}$ es prácticamente el mismo para los 5 casos.

Cabe además comentar que las masas efectivas obtenidas en el punto Γ son isotropas tal y como cabía esperar ya que, debido a las simetrías del cristal, en ese punto los tres ejes son equivalentes.

En las figuras 4.16-4.56 se puede observar la no parabolicidad de la mayoría de las bandas, es decir, las superficies isoenergéticas no son esferas. De nuevo, se

observa la consistencia de los resultados ya que las formas de bandas equivalentes para cada uno de los hamiltonianos son muy parecidas.

En las figuras 4.57-3.179 se hace aún más notable la no parabolicidad de las bandas. La mayoría de las bandas presentan una fuerte dependencia con \vec{k} en una forma no parabólica lo que hace que tratar a los electrones, o huecos, en estas bandas como partículas libres no sea una aproximación adecuada. Debido a las simetrías de los ejes Λ y Δ , los tensores de masas efectivas en estos ejes presentan dos componentes iguales y una distinta correspondientes a dos masas transversales al eje y otra longitudinal. No ocurre lo mismo en el eje Σ a lo largo del cual se obtienen tensores de masa efectiva con las tres componentes distintas.

Comparando los resultados obtenidos para $H_{8 \times 8}$ y $H_{8 \times 8(k\pi)}$ se puede concluir que el término τ^{op} es totalmente despreciable y que en la expresión (3.15) se puede sustituir $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$ por $\vec{k} \cdot \vec{p}$ sin cometer un error apreciable.

En conclusión, el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ es un método sencillo de implementar en el ordenador y de cómputo rápido, ya que permite trabajar con una base reducida de autoestados, que proporciona buenos resultados para entornos reducidos del punto Γ .

5.1. Conclusions

In this work we have studied the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method for Gallium Arsenide and we have obtain results for energy bands, isoenergetic surfaces and efective masses.

The results for energy bands reproduce quite well the energy bands in Gallium Arsenide but only for small values of \vec{k} . As we move away from *Gamma* point, the value of \vec{k} increases making the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ more significant to the point where we can no longer treat it as a perturbation. In figures 1-15 we can observe the tendency of the bands to grow in a parabolic way reaching energy values too high. Nevertheless, the results for small k are quite good.

p_i -type energy bands for $H_{4 \times 4}$ as well as for $H_{7 \times 7}$ along Δ and Λ axis appear in one non-degenerate band and other twice-degenerated band. This is because if

we made a coordinates transformation so one axis is along the Δ or Λ axis and the other two axis are perpendicular, we can transform one perpendicular axis into the other by applying symmetry operations and therefore, the this two axis are equivalent. This does not occur along the Σ axis because we can not transform one perpendicular axis into the other by applying symmetry operations. The same argument is valid to explain band degeneracies for $H_{8 \times 8}, H_{8 \times 8(k\pi)}, H_{14 \times 14}$ along the Δ and Λ axis.

We can observe in bands 4.7-4.15 that spin-orbit interaction splits p_i -type states raising the energy of states with $J = \frac{3}{2}$ and lowering the energy of states with $J = \frac{1}{2}$ just as one would expect.

The obtained results for effective masses in Γ correspond quite well with experimental values:

m^*/m_0	Valor Experimental	Método $\vec{k} \cdot \vec{p}$
m_e	0.067	0.055
m_{lh}	-0.08	-0.03
m_{hh}	-0.53	-0.38

Cuadro 5.2: Comparison between theoretical and experimental effective mass values in Γ . The experimental values have been taken from [1].

Comparing the results for the different models we can say that the results are very consistent since for the same states in each model we obtain similar results.

As one would expect, the effective masses in Γ are isotropic since due to the symmetries of the crystal the three axes are equivalent.

In figures 4.16-4.56 the non-parabolicity of the bands can be observed. The isoenergetic surfaces are no longer spheres.

In figures 4.57-4.179 the non-parabolicity of the bands is even more noticeable. The majority of the bands show a strong dependency with \vec{k} in a non-parabolic way that makes treating the electron, or holes, in these bands not a good approximation. Due to the symmetries in Λ and Δ axis the effective mass tensor has two components that are equal and other component that is different to the

other two which correspond to longitudinal masses and transversal mass respectively. This does not occur in *Sigma* axis where all three components are different.

Comparing results from $H_{8 \times 8}$ and $H_{8 \times 8(kpi)}$ we can infer that the term τ^{op} is totally negetible and in formula (3.15) one can substitute $\vec{k} \cdot \vec{\pi}$ by $\vec{k} \cdot \vec{p}$ with no error.

In conclusion, $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method is a easy to implement method in a computer of fast calculation that provides good result for small values of \vec{k}

Apéndice A

Teoría de perturbaciones de Löwdin

Para poder tratar la influencia mutua de dos clases de estados sin perturbar, Löwdin desarrolló una teoría de perturbaciones, que se reduce a la habitual teoría de perturbaciones no degenerada cuando una de estas clases tiene únicamente un estado.

A.1. Principio variacional

Dado un conjunto de autoestados sin perturbar, se puede escribir cualquier otro estado del espacio en la forma

$$\psi \approx \sum_{n=1}^N \psi_n^{(0)} C_n \quad (\text{A.1})$$

Sólo es una igualdad cuando $\{\psi_n^{(0)}\}$ es una base completa, y en ese caso los coeficientes C_n están determinados por la elección de la base. Si la base no es completa, la relación es sólo aproximada y los C_n pueden elegirse de tal manera que se minimize el error.

La energía del estado será

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{nm} \frac{C_m^* \langle \psi_m^{(0)} | H | \psi_n^{(0)} \rangle C_n}{\sum_n C_n^* C_n} = \sum_{nm} \frac{C_m^* H_{mn} C_n}{\sum_n C_n^* C_n} \quad (\text{A.2})$$

Según el principio variacional, la energía es un extremal cuando se cumple $\frac{\partial E}{\partial C_m} = 0$ y por lo tanto

$$\sum_{n=1}^N [H_{mn} - E\delta_{mn}] C_n = 0 ; m = 1, N \quad (\text{A.3})$$

A.2. Fórmula de la perturbación

Primeramente se divide la base $\{\psi_n^{(0)}\}$ en dos clases:

$$\psi = \sum_{m \in A} \psi_m^{(0)} + \sum_{n \in B} \psi_n^{(0)} \quad (\text{A.4})$$

El conjunto A es los estados para los cuales queremos calcular sus autovalores y el conjunto B es aquellos estados que cuya influencia será una perturbación en los estados de A.

Sacando del sumatorio el término m en la ecuación (A.3) se tiene

$$(E - H_{mm})C_m = \sum_{n \in A} H'_{nm} C_n + \sum_{m \in B} H'_{nm} C_n \quad (\text{A.5})$$

Con

$$H'_{nm} = H_{nm}(1 - \delta_{mn}) \quad (\text{A.6})$$

Despejando los coeficientes C_m

$$C_m = \left(\sum_{n \in A} + \sum_{m \in B} \right) \frac{H'_{nm}}{E - H'_{mm}} C_n = \left(\sum_{n \in A} + \sum_{m \in B} \right) h'_{mn} C_n \quad (\text{A.7})$$

Iterando a los coeficientes en la suma en B

$$C_m = \sum_{n \in A} h'_{mn} C_n + \sum_{m \in B} h'_{mn} C_n \quad (\text{A.8})$$

$$= \sum_{n \in A} h'_{mn} C_n + \sum_{m \in B} h'_{mn} \left(\sum_{\alpha \in A} h'_{n\alpha} C_\alpha + \sum_{\alpha \in B} h'_{n\alpha} C_\alpha \right) \quad (\text{A.9})$$

$$= \sum_{n \in A} h'_{mn} C_n + \sum_{n \in A} \sum_{\alpha \in B} h'_{\alpha n} h'_{m\alpha} C_n + \sum_{n \in A} \sum_{\alpha, \beta \in B} h'_{\beta n} h'_{m\alpha} h'_{\alpha\beta} C_n + \dots \quad (\text{A.10})$$

$$= \sum_{n \in A} \left[h'_{nm} + \sum_{\alpha \in B} h'_{m\alpha} h'_{\alpha n} + \sum_{\alpha, \beta \in B} h'_{m\alpha} h'_{\alpha\beta} h'_{\beta n} + \dots \right] C_n \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{1}{(E - H_{mm})} \sum_{n \in A} \left[H'_{mn} + \sum_{\alpha \in B} \frac{H'_{m\alpha} H'_{\alpha n}}{(E - H'_{\alpha\alpha})} + \sum_{\alpha \in B} \frac{H'_{m\alpha} H'_{\alpha\beta} H'_{\beta n}}{(E - H'_{\alpha\alpha})(E - H'_{\beta\beta})} + \dots \right] C_n \quad (\text{A.12})$$

$$= \frac{1}{(E - H_{mm})} \sum_{n \in A} [U_{mn}^A - H_{mn} \delta_{mn}] C_n \quad (\text{A.13})$$

donde

$$U_{mn}^A = H'_{mn} + \sum_{\alpha \in B} \frac{H'_{m\alpha} H'_{\alpha n}}{(E - H'_{\alpha\alpha})} + \sum_{\alpha \in B} \frac{H'_{m\alpha} H'_{\alpha\beta} H'_{\beta n}}{(E - H'_{\alpha\alpha})(E - H'_{\beta\beta})} + \dots \quad (\text{A.14})$$

Para un $m \in A$,

$$(E - H_{mm}) C_m = \sum_{n \in A} [U_{mn}^A - H_{mn} \delta_{mn}] C_n \quad (\text{A.15})$$

$$\Rightarrow \sum_{m, n \in A} [U_{mn}^A - E \delta_{mn}] = 0 \quad (\text{A.16})$$

Se obtiene un conjunto de ecuaciones seculares donde el hamiltoniano original ha sido reemplazado con el hamiltoniano perturbado U_{mn}^A .

Apéndice B

Código fuente de los programas

B.1. Cálculo de bandas de energía

Para el cálculo de las bandas de energía se ha escrito un programa en fortran que se encarga de leer los parámetros del AsGa necesarios y de calcular los valores de energía para cada banda a lo largo de los puntos de los ejes Λ , Δ y Σ y escribe los resultados en un archivo para posteriormente poder hacer una representación gráfica de los datos haciendo uso del programa *gnuplot*.

A continuación se presenta el código fuente utilizado para el cálculo de las bandas de energía para el caso $H_{4 \times 4}$. Para los demás casos el programa es totalmente análogo pero teniendo en cuenta que la dimensión del hamiltoniano cambia y que la subrutina de construcción del hamiltoniano es distinta en cada caso y se deben incluir además los parámetros referentes a la interacción espín-órbita en el caso de los hamiltonianos $H_{8 \times 8}$, $H_{8 \times 8(kp)}$ y $H_{14 \times 14}$.

B.1.1. Programa principal

```
1 ! Calcula las bandas de energía a lo largo de tres ejes:
2 ! Eje Delta (1,0,0), Eje Lambda (1,1,1) y Eje Sigma (1,1,0)
3 PROGRAM bandas
4
5 ! Declaración de VARIABLES
6 IMPLICIT NONE
7
8 INTEGER :: i , ip !Índices DO
9
```

```

INTEGER :: ndim !Dimensión de la matriz hamiltoniana
11 PARAMETER (ndim=4)

13 ! Parámetros subrutina de diagonalización (EIGCH)
INTEGER :: IW,IJOB, IER
15 PARAMETER (IW=ndim)
PARAMETER(IJOB=12)

17 !Área de trabajo en subrutina de diagonalización (EIGCH)
19 REAL(KIND(0.0D0)) :: WKD(2*IW*IW+4*IW)

21 !Coordenadas cartesianas del vector de onda
REAL(KIND(0.0D0)) :: KX, KY, KZ
23 !Recorrido del eje x en sentido creciente
REAL(KIND(0.0D0)) :: paso, PK

25 REAL(KIND(0.0D0)) :: AVS(ndim) !Autovalores
27

29 !Matriz hamiltoniana
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: HKP(ndim, ndim)

31 !Vectores propios
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: AUFS(ndim, ndim)
33

35 !Parámetros del AsGa
REAL(KIND(0.0D0)) :: E0,E1,P0,P1,Q,a,g1,g2,g3
INTEGER :: np !Número de puntos
37

39 !Valores inicial y final del ámetro x
REAL(KIND(0.0D0)) :: xi, xf

41

43 ! Leo los parámetros de entrada del archivo
OPEN(11,FILE='datos.dat') !Abro el fichero de entrada
READ(11,*) E0 !Energía de los estados  $s_c$ 
45 READ(11,*) E1 !Energía de los estados  $p_c$ 
READ(11,*) P0 !Parámetro P
47 READ(11,*) P1 !Parámetro P'
READ(11,*) Q !Parámetro Q
49 READ(11,*) g1 !Parámetros de Luttinger
READ(11,*) g2
51 READ(11,*) g3

```

```

    READ(11,*) a !Constante de red
53  CLOSE(11)

    ! CONSTRUCCIÓN y DIAGONALIZACIÓN
    ! a lo largo del eje: Delta (x,0,0)
55  ! CONSTRUCCIÓN y DIAGONALIZACIÓN
    ! a lo largo del eje: Delta (x,0,0)
57  OPEN(12,FILE='ejedelta.dat') !Abro el fichero de salida

59  xi = -0.2d0 !x inicial
    xf = 0.2d0 !x final
61

    !Inicializo el valor de k
63  KX = 0.0d0
    KY = 0.0d0
65  KZ = 0.0d0

67  paso = (xf - xi) / np

69  DO ip = 0,np

71  KX = xi + ip * paso

73  PK = KX

75  !Subrutina de CONSTRUCCIÓN
    CALL HAMKP(KX,KY,KZ,HKP,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,a,ndim)
77  !Subrutina de DIAGONALIZACIÓN
    CALL EIGCH(HKP,ndim,IJOB,AVS,AUFS,ndim,WKD,IER)
79

    WRITE (12,20) PK,(AVS(i),i=1,ndim)
81

    END DO
83  CLOSE(12)

    ! CONSTRUCCIÓN y DIAGONALIZACIÓN
    ! a lo largo del eje Lambda (x,x,x)
85  ! CONSTRUCCIÓN y DIAGONALIZACIÓN
    ! a lo largo del eje Lambda (x,x,x)
87  OPEN(12,FILE='ejelambda.dat') !Abro el fichero de salida

89  xi =-0.1d0 !x inicial
    xf =0.1d0 !x final
91

    !Inicializo el valor de k
93  KX = 0.0d0
```

```

95  KY = 0.0d0
    KZ = 0.0d0

97  paso = (xf - xi) / np

99  DO ip = 0,np

101  KX = xi + ip * paso
    KY = KX
103  KZ = KX

105  PK = KX

107  !Subrutina de CONSTRUCCIÓN
    CALL HAMKP(KX,KY,KZ,HKP,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,a,ndim)
109  !Subrutina de DIAGONALIZACIÓN
    CALL EIGCH(HKP,ndim,IJOB,AVS,AUFS,ndim,WKD,IER)
111  !Escritura de resultados
    WRITE (12,20) PK,(AVS(i),i=1,ndim)
113

115  END DO
    CLOSE(12)

117  ! CONSTRUCCIÓN y DIAGONALIZACIÓN
    ! a lo largo del eje Sigma (x,x,0)
119  OPEN(12,FILE='ejesigma.dat') !Abro el fichero de salida

121  xi = -0.1d0 !x inicial
    xf = 0.1d0  !x final

123

    !Inicializo el valor de k
125  KX = 0.0d0
    KY = 0.0d0
127  KZ = 0.0d0

129  paso = (xf - xi) / np

131  DO ip = 0,np

133  KX = xi + ip * paso
    KY = KX

135
```

```

PK = KX
137
!Subrutina de CONSTRUCCIÓN
139 CALL HAMKP(KX,KY,KZ,HKP,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,a,ndim)
!Subrutina de DIAGONALIZACIÓN
141 CALL EIGCH(HKP,ndim,IJOB,AVS,AUFS,ndim,WKD,IER)
!Escritura de resultados
143 WRITE (12,20) PK,(AVS(i),i=1,ndim)

145 END DO
CLOSE(12)
147
20 FORMAT(1x,10(E14.7,1x))
149
STOP
151 END PROGRAM bandas

```

ejes.f

B.1.2. Subrutina de construcción del hamiltoniano

```

1 ! Esta subrutina toma como parámetros de entrada los parámetros del
! AsGa, las coordenadas del vector de onda y una matriz H.
3 ! Tras realizar los cálculos devuelve a través de la matriz H
! el hamiltoniano k.p correspondiente a ese punto k.
5
SUBROUTINE HAMKP(X,Y,Z,H,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,red,ndim)
7
! X,Y,Z → KX,KY,KZ Coordenadas cartesianas del vector de onda
9 ! H → HKP Matriz hamiltoniana
! E0 → E0 Energía u tipo s en banda de conduccion
11 ! E1 → E1 Energía u tipo p en banda de conduccion
! P0 → P0 Interacción  $u_{sc}$  con  $u_{pv}$ 
13 ! P1 → P1 Interacción  $u_{sc}$  con  $u_{pc}$ 
! Q → Q Interacción  $u_{pv}$  con  $u_{pc}$ 
15 ! N → N Dimensión de la matriz hamiltoniana
! g1,g2,g3 Parámetros de Luttinger
17 !* La energía del estado  $u_{pv}$  se toma como origen de energías

19 *****
! ORDENACIÓN DE LA BASE: sc,pxv,pyv,pzv
21 *****

```



```

23 ! Declaración de VARIABLES

25 INTEGER      I , J
INTEGER      ndim

27

29 REAL*8       X, Y, Z
REAL*8       ALFA, BETA, DOSPI
REAL*8       E0, E1, P0, P1, Q, red , L, M, N, g1 , g2 , g3
31 REAL*8       P0l , P1l , Ql , A, B

33 COMPLEX*16   H(ndim , ndim)

35 ! Defición de CONSTANTES
DOSPI=6.28318530718d0 !(2*pi)
37 !(eV) alfa=(hbar**2)*2*(PI**2)/m/(a**2)
ALFA=150.412063818d0/red**2
39 BETA=3.80998201d0 !(eV/A**2) (hbar**2)/(2m)

41 L=-BETA*( g1 +4.d0*g2 +1.d0)
M=-BETA*( g1 -2.d0*g2 +1.d0)
43 N=-BETA*6.d0*g3

45 L=L*(DOSPI/red)**2
M=M*(DOSPI/red)**2
47 N=N*(DOSPI/red)**2

49 Ql=Q*(DOSPI/red)
P0l=P0*(DOSPI/red)
51 P1l=P1*(DOSPI/red)

53 A=(P1l**2)/(E0-E1)
B=Ql*P1l/(E0/2-E1)

55

! Cálculo del HAMILTONIANO

57

! Inicializo con ceros
59 DO J=1, ndim
DO I=1, ndim
61 H(I, J)=dcmplx(0.d0, 0.d0)
END DO
63 END DO

```

```

65 ! Lleno la diagonal
   H(1,1)=dcmplx (E0+ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+A*(X**2+Y**2+Z**2) ,0.d0)
67   H(2,2)=dcmplx (ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*X**2+M*(Y**2+Z**2) ,0.d0)
   H(3,3)=dcmplx (ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*Y**2+M*(X**2+Z**2) ,0.d0)
69   H(4,4)=dcmplx (ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*Z**2+M*(X**2+Y**2) ,0.d0)

71 ! Lleno el triángulo superior
   H(1,2)=dcmplx (B*Y*Z ,P01*X)

73
   H(1,3)=dcmplx (B*X*Z ,P01*Y)
75   H(2,3)=dcmplx (N*X*Y ,0.d0)

77   H(1,4)=dcmplx (B*X*Y ,P01*Z)
   H(2,4)=dcmplx (N*X*Z ,0.d0)
79   H(3,4)=dcmplx (N*Y*Z ,0.d0)

81 ! Lleno el triángulo inferior como el hermítico del superior
   DO J=1,ndim-1
83     DO I=J+1,ndim
         H(I,J)=dconjg (H(J,I))
85     END DO
   END DO

87
   RETURN
89   END

```

hkp4x4.f

B.1.3. Subrutina de construcción del hamiltoniano con espín-órbita

En el caso de considerar la interacción espín-órbita la subrutina de construcción del hamiltoniano es un poco distinta. A continuación se muestra el código de la subrutina en el caso $H_{8 \times 8}$, para el resto de casos con interacción espín-órbita la subrutina es análoga.

```

1  SUBROUTINE HAMKP(X,Y,Z,H,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,delta0,a,ndim)
3
5  ! Declaración de VARIABLES

```

```

INTEGER :: I , J
7  INTEGER :: ndim

9  REAL(KIND(0.0D0)) :: X , Y , Z
REAL(KIND(0.0D0)) :: ALFA , DPI2 , PI , DOSPI
11 REAL(KIND(0.0D0)) :: E0 , E1 , P0 , P1 , Q , a , L , M , N , g1 , g2 , g3 , delta0
REAL(KIND(0.0D0)) :: P0l , P1l , Ql

13
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: H(ndim , ndim) , Sinv(ndim , ndim) , S(ndim , ndim)
15 COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: Maux(ndim , ndim)

17 !BASE DUPLICADA:
    p1v+ , p2v+ , p3v+ , p1v- , p2v- , p3v- , p1c+ , p2c+ , p3c+ , p1c- , p2c- , p3c- , s+ , s- ,

19 ! Defición de CONSTANTES
    DOSPI=6.28318530718d0 !(2*pi)
21 ALFA=150.412063818d0/a**2 !(eV) alfa=(hbar**2)*2*(PI**2)/m/(a**2)
    BETA=3.80998201d0 !(eV/A**2) (hbar**2)/(2m)

23
    L=-BETA*(g1+4.d0*g2+1.d0)
25 M=-BETA*(g1-2.d0*g2+1.d0)
    N=-BETA*6.d0*g3

27
    L=L*(DOSPI/a)**2
29 M=M*(DOSPI/a)**2
    N=N*(DOSPI/a)**2

31
    Ql=Q*(DOSPI/a)
33 P0l=P0*(DOSPI/a)
    P1l=P1*(DOSPI/a)

35
! Inicializo con ceros
37
DO J=1 , ndim
39     DO I=1 , ndim
        H(I , J)=dcmplx(0.d0 , 0.d0)
41     END DO
END DO

43
! Lleno la diagonal de las submatrices Hpp
45 H(1 , 1)=dcmplx(ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*X**2+M*(Y**2+Z**2) , 0.d0)
    H(2 , 2)=dcmplx(ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*Y**2+M*(X**2+Z**2) , 0.d0)
47 H(3 , 3)=dcmplx(ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*Z**2+M*(X**2+Y**2) , 0.d0)

```

```

49  H(4,4)=dcmplx(ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*X**2+M*(Y**2+Z**2),0.d0)
    H(5,5)=dcmplx(ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*Y**2+M*(X**2+Z**2),0.d0)
51  H(6,6)=dcmplx(ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)+L*Z**2+M*(X**2+Y**2),0.d0)

53  ! Lleno el triángulo superior de las submatrices Hpp
    H(1,2)=dcmplx(N*X*Y,0.d0)
55  H(4,5)=dcmplx(N*X*Y,0.d0)

57  H(1,3)=dcmplx(N*X*Z,0.d0)
    H(4,6)=dcmplx(N*X*Z,0.d0)

59  H(2,3)=dcmplx(N*Y*Z,0.d0)
61  H(5,6)=dcmplx(N*Y*Z,0.d0)

63  ! Columna Hps up
    H(1,7)=dcmplx(Q1*P11*Y*Z*(1.d0/(E0-E1)-1.d0/E1),P01*X)
65  H(2,7)=dcmplx(Q1*P11*X*Z*(1.d0/(E0-E1)-1.d0/E1),P01*Y)
    H(3,7)=dcmplx(Q1*P11*X*Y*(1.d0/(E0-E1)-1.d0/E1),P01*Z)

67  ! Columna Hps down
    H(4,8)=dcmplx(Q1*P11*Y*Z*(1.d0/(E0-E1)-1.d0/E1),P01*X)
69  H(5,8)=dcmplx(Q1*P11*X*Z*(1.d0/(E0-E1)-1.d0/E1),P01*Y)
    H(6,8)=dcmplx(Q1*P11*X*Y*(1.d0/(E0-E1)-1.d0/E1),P01*Z)

71  ! Terminos diagonales de los s
    H(7,7)=dcmplx(E0+ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)
73  >+P11**2*(X**2+Y**2+Z**2)/(E0-E1),0.d0)
    H(8,8)=dcmplx(E0+ALFA*(X**2+Y**2+Z**2)
75  >+P11**2*(X**2+Y**2+Z**2)/(E0-E1),0.d0)

77  ! Lleno el triángulo inferior como el hermitico del superior

79  DO J=1,ndim-1
    DO I=J+1,ndim
81      H(I,J)=dconjg(H(J,I))
    END DO
83  END DO

85  ! Construyo la MATRIZ DE PASO S

87  ! Inicializo con ceros

89  DO J=1,ndim

```

```

    DO I=1,ndim
91      Sinv(I,J)=dcmplx(0.d0,0.d0)
        S(I,J)=dcmplx(0.d0,0.d0)
93    END DO
END DO
95
! Lleno los elementos distintos de cero
97
S(1,1)=dcmplx(-dsqrt(0.5d0),0.d0)
99 S(3,1)=dcmplx(dsqrt(1.d0/6.d0),0.d0)
S(6,1)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
101
S(1,2)=dcmplx(0.d0,dsqrt(0.5d0))
103 S(3,2)=dcmplx(0.d0,dsqrt(1.d0/6.d0))
S(6,2)=dcmplx(0.d0,-dsqrt(1.d0/3.d0))
105
S(2,3)=dcmplx(dsqrt(2.d0/3.d0),0.d0)
107 S(5,3)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
109
S(2,4)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/6.d0),0.d0)
S(4,4)=dcmplx(dsqrt(1.d0/2.d0),0.d0)
111 S(5,4)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
113
S(2,5)=dcmplx(0.d0,dsqrt(1.d0/6.d0))
S(4,5)=dcmplx(0.d0,dsqrt(1.d0/2.d0))
115 S(5,5)=dcmplx(0.d0,dsqrt(1.d0/3.d0))
117
S(3,6)=dcmplx(dsqrt(2.d0/3.d0),0.d0)
S(6,6)=dcmplx(dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
119
S(7,7)=dcmplx(1.d0,0.d0)
121 S(8,8)=dcmplx(1.d0,0.d0)
123 ! Ahora la inversa
125
Sinv(1,1)=dcmplx(-dsqrt(0.5d0),0.d0)
Sinv(2,1)=dcmplx(0.d0,-dsqrt(0.5d0))
127
Sinv(3,2)=dcmplx(dsqrt(2.d0/3.d0),0.d0)
129 Sinv(4,2)=dcmplx(-1.d0/sqrt(6.d0),0.d0)
Sinv(5,2)=dcmplx(0.d0,-1.d0/sqrt(6.d0))
131

```

```

133  Sinv(1,3)=dcmplx(1.d0/sqrt(6.d0),0.d0)
      Sinv(2,3)=dcmplx(0.d0,-1.d0/sqrt(6.d0))
      Sinv(6,3)=dcmplx(dsqrt(2.d0/3.d0),0.d0)
135
      Sinv(4,4)=dcmplx(dsqrt(0.5d0),0.d0)
137  Sinv(5,4)=dcmplx(0.d0,-dsqrt(0.5d0))
139  Sinv(3,5)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
      Sinv(4,5)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
141  Sinv(5,5)=dcmplx(0.d0,-dsqrt(1.d0/3.d0))
143  Sinv(1,6)=dcmplx(-dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
      Sinv(2,6)=dcmplx(0.d0,dsqrt(1.d0/3.d0))
145  Sinv(6,6)=dcmplx(dsqrt(1.d0/3.d0),0.d0)
147  Sinv(7,7)=dcmplx(1.d0,0.d0)
      Sinv(8,8)=dcmplx(1.d0,0.d0)
149
! Realizo el cambio de base
151  CALL PRODD88(S,H,Max) !M=S*H
153  CALL PRODD88(Max,Sinv,H) !H=S*H*S**(-1)
155 ! Sumo los términos de espín-órbita
157  H(1,1)=H(1,1)+dcmplx(delta0/3.d0,0.d0)
      H(2,2)=H(2,2)+dcmplx(delta0/3.d0,0.d0)
159  H(3,3)=H(3,3)+dcmplx(delta0/3.d0,0.d0)
      H(4,4)=H(4,4)+dcmplx(delta0/3.d0,0.d0)
161
      H(5,5)=H(5,5)+dcmplx(-2.d0*delta0/3.d0,0.d0)
163  H(6,6)=H(6,6)+dcmplx(-2.d0*delta0/3.d0,0.d0)
165  RETURN
      END

```

hkp8x8.f

B.1.4. Subrutina EIGCH de diagonalización de matrices

Para la diagonalización de matrices se hace uso de la subrutina EICH que además de diagonalizar matrices, devuelve autovalores, autovectores, las matrices

de paso, la matriz de permutaciones, etc.

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
2  C      EIGCH      C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
4  ! IMSL ROUTINE NAME - EIGCH EICH0010C
   !C-----
6  C
   ! COMPUTER - DG7/DOUBLE
8  C
   ! LATEST REVISION - JUNE 1, 1980
10 C
   ! PURPOSE - EIGENVALUES AND (OPTIONALLY) EIGENVECTORS OF
12 ! A COMPLEX HERMITIAN MATRIX
   C
14 ! USAGE - CALL EIGCH (A,N,JOBN,D,Z,IZ,WK,IER)
   C
16 ! ARGUMENTS A - INPUT COMPLEX HERMITIAN MATRIX OF ORDER N
   ! WHOSE EIGENVALUES AND EIGENVECTORS ARE
18 ! TO BE COMPUTED. INPUT A IS DESTROYED IF
   ! IJOB IS EQUAL TO 0 OR 1.
20 ! NOTE - THE ROUTINE TREATS A AS A REAL VECTOR.
   ! AN EQUIVALENCE STATEMENT MAY BE REQUIRED-
22 ! SEE DOCUMENT EXAMPLE.
   ! N - INPUT ORDER OF THE MATRIX A AND MATRIX Z.
24 ! JOBN - INPUT OPTION PARAMETER. IF JOBN.GE.10
   ! A IS ASSUMED TO BE IN FULL COMPLEX STORAGE
26 ! MODE (MUST BE DIMENSIONED EXACTLY N BY N).
   ! IF JOBN.LT.10 THEN A IS ASSUMED TO BE IN
28 ! HERMITIAN STORAGE MODE. DEFINE
   ! IJOB=MOD(JOBN,10). THEN WHEN
30 ! IJOB = 0, COMPUTE EIGENVALUES ONLY.
   ! IJOB = 1, COMPUTE EIGENVALUES AND EIGEN-
32 ! VECTORS.
   ! IJOB = 2, COMPUTE EIGENVALUES, EIGENVECTORS
34 ! AND PERFORMANCE INDEX.
   ! IJOB = 3, COMPUTE PERFORMANCE INDEX ONLY.
36 ! IF THE PERFORMANCE INDEX IS COMPUTED, IT IS
   ! RETURNED IN WK(1). THE ROUTINES HAVE
38 ! PERFORMED (WELL, SATISFACTORILY, POORLY) IF
   ! WK(1) IS (LESS THAN 1, BETWEEN 1 AND 100,
40 ! GREATER THAN 100).
   ! D - OUTPUT VECTOR OF LENGTH N CONTAINING THE

```

```
42 ! EIGENVALUES OF A.
! Z - OUTPUT N BY N COMPLEX MATRIX CONTAINING
44 ! THE EIGENVECTORS OF A.
! THE EIGENVECTOR IN COLUMN J OF Z CORRES-
46 ! PONDOS TO THE EIGENVALUE D(J).
! IF IJOB = 0, Z IS NOT USED.
48 ! NOTE - THE ROUTINE TREATS Z AS A REAL VECTOR
! OF LENGTH 2*N*N. AN APPROPRIATE EQUIVALENCE
50 ! STATEMENT MAY BE REQUIRED. SEE DOCUMENT
! EXAMPLE.
52 ! IZ - INPUT ROW DIMENSION OF MATRIX Z EXACTLY AS
! SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT IN THE
54 ! CALLING PROGRAM. IZ MUST BE GREATER THAN
! OR EQUAL TO N IF IJOB IS NOT EQUAL TO ZERO.
56 ! WK - WORK AREA, THE LENGTH OF WK DEPENDS
! ON THE VALUE OF IJOB, WHEN
58 ! IJOB = 0, THE LENGTH OF WK IS AT LEAST 3N.
! IJOB = 1, THE LENGTH OF WK IS AT LEAST 3N.
60 ! IJOB = 2, THE LENGTH OF WK IS AT LEAST
! N*N+4N.
62 ! IJOB = 3, THE LENGTH OF WK IS AT LEAST 1.
! IER - ERROR PARAMETER. (OUTPUT)
64 ! TERMINAL ERROR
! IER = 128+J, INDICATES THAT EQRT2S
66 ! FAILED TO CONVERGE ON EIGENVALUE J.
! EIGENVALUES J+1,J+2,...,N HAVE BEEN
68 ! COMPUTED CORRECTLY.
! THE PERFORMANCE INDEX IS SET TO 1000.0.
70 ! WARNING ERROR (WITH FIX)
! IN THE FOLLOWING, IJOB = MOD(JOBN,10).
72 ! IER = 66, INDICATES IJOB IS LESS THAN 0 OR
! IJOB IS GREATER THAN 3. IJOB IS SET TO 1.
74 ! IER = 67, INDICATES IJOB IS NOT EQUAL TO
! ZERO, AND IZ IS LESS THAN THE ORDER OF
76 ! MATRIX A. IJOB IS SET TO ZERO.
! IER = 68, INDICATES THAT MATRIX A IS NOT
78 ! HERMITIAN BECAUSE SOME DIAGONAL ELEMENT(S)
! ARE NOT REAL. EIGCH SETS THE IMAGINARY
80 ! PART OF THESE ELEMENTS TO ZERO AND
! PROCEEDS WITH THE COMPUTATIONS.
82 C
! PRECISION/HARDWARE - SINGLE AND DOUBLE/H32
```



```

84 ! - SINGLE/H36,H48,H60
C
86 ! REQD. IMSL ROUTINES - EHBCKH,EHOUSH,EQRT2S,UERTST,UGETIO
C
88 ! NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND
! CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL
90 ! INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP
C
92 ! COPYRIGHT - 1980 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.
C
94 ! WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN
! APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,
96 ! EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.
C
98 C_____
C
100     SUBROUTINE EIGCH  (A,N,JOBN,D,Z,IZ,WK,IER)
! SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS
102     INTEGER          N,JOBN,IZ,IER
     DOUBLE PRECISION  A(1),D(N),Z(1),WK(1)
104 ! SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES
     INTEGER          JER,K,I,NE,NTAU,NA,NI,N12,IM1,J,IIZ,NZ,IIZ1
,
106     1                IJOB,JR,IR,IJ,JI,NP1,
     2                JZ,JZI,L,M,II,IL,KK,LZ,MZ,LK,KZ
108     DOUBLE PRECISION ANORM,ASUM,PI,SUMZ,SUMR,SUMI,S,TEN,RDELP,
     1                ZERO,ONE,THOUS,AN,SIGNA
110     DATA            RDELP/0.2220446050D-15/
     DATA            ZERO,ONE/0.0D0,1.0D0/,TEN/10.0D0/,THOUS
/1000.0D
112     *0/
! INITIALIZE ERROR PARAMETERS
114 ! FIRST EXECUTABLE STATEMENT
     IER = 0
116     JER = 0
     IF (JOBN.LT.10) GO TO 15
118 ! CONVERT TO HERMETIAN STORAGE MODE
     JR = N + N - 2
120     IJ = 2
     K = 2
122     DO 10 J=1,N
         DO 5 I=1,J

```

```

124         A(K-1) = A(IJ-1)
           A(K) = -A(IJ)
126         K = K+2
           IJ = IJ + 2
128     5    CONTINUE
           IJ = IJ + JR
130         JR = JR - 2
10 CONTINUE
132     15 IJOB = MOD(JOBN,10)
           IF (IJOB.GE.0.AND.IJOB.LE.3) GO TO 20
134 ! WARNING ERROR - IJOB IS NOT IN THE
! RANGE
136         IER = 66
           IJOB = 1
138         GO TO 25
20 IF (IJOB.EQ.0) GO TO 45
140     25 IF (IZ.GE.N) GO TO 30
! WARNING ERROR - IZ IS LESS THAN N
142 ! EIGENVECTORS CAN NOT BE COMPUTED,
! IJOB SET TO ZERO
144         IER = 67
           IJOB = 0
146     30 K = 2
           DO 40 I=1,N
148             IF (A(K).EQ.ZERO) GO TO 35
               A(K) = ZERO
150 ! WARNING ERROR - SOME DIAGONAL
! ELEMENT(S) NOT REAL
152         IER = 68
35     K = K+I+I+2
154     40 CONTINUE
           IF (IJOB.EQ.3) GO TO 110
156     45 NE = 1
           NTAU = NE+N
158         NA = NTAU+N+N
           NI = (N*(N+1))/2
160         NI2 = NI+NI
           IF (IJOB.NE.2) GO TO 55
162 ! SAVE INPUT A IF IJOB = 2
           K = NA
164         DO 50 I=1,NI2
           WK(K) = A(I)

```

```

166         K = K+1
168     50 CONTINUE
168 ! SEPARATE A INTO REAL AND IMAGINARY
! PARTS
170     55 IF (NI.LT.2) GO TO 70
        IM1 = 1
172     DO 65 I=2,NI
        K = IM1+I
174         PI = A(K)
        DO 60 J=1,IM1
176             A(K) = A(K-1)
            K = K-1
178     60 CONTINUE
        A(I) = PI
180         IM1 = I
        65 CONTINUE
182 ! REDUCE HERMITIAN MATRIX TO A REAL
! SYMMETRIC TRIDIAGONAL MATRIX
184     70 CALL EHOUSH (A(1),A(NI+1),N,D,WK(NE),WK(NTAU))
        IIZ = 1
186         IF (IJOB.NE.0) IIZ = IZ+IZ
        IF (IIZ.EQ.1) GO TO 85
188 ! SET Z TO AN IDENTITY MATRIX
        NZ = (IZ+IZ)*N
190         DO 75 I=1,NZ
            Z(I) = ZERO
192     75 CONTINUE
        K = 1
194         IIZ1 = IIZ+1
        DO 80 I=1,N
196             Z(K) = ONE
            K = K+IIZ1
198     80 CONTINUE
! COMPUTE EIGENVALUES AND EIGENVECTORS
200     85 CALL EQRT2S (D,WK(NE),N,Z(1),IIZ,JER)
        IF (IJOB.EQ.0) GO TO 9000
202 ! BACKTRANSFORM THE EIGENVECTORS
        CALL EHBCKH (A(1),A(NI+1),WK(NTAU),N,Z(1),Z(IZ+1),IIZ)
204 ! CONVERT Z (EIGENVECTORS) TO COMPLEX
! FORMAT Z(IZ,N)
206         JZ = 0
        DO 100 J=1,N

```

```

208         JZI = JZ+IZ
          DO 90 I=1,N
210             K = JZI+I
              WK(I) = Z(K)
212     90    CONTINUE
          K = JZ+N
214         L = K+N-1
          M = N
216         DO 95 I=1,N
              Z(L) = Z(K)
218             Z(L+1) = WK(M)
              K = K-1
220             L = L-2
              M = M-1
222     95    CONTINUE
          JZ = JZ+IZ+IZ
224     100   CONTINUE
          ! Z IS NOW IN COMPLEX FORMAT Z(IZ,N).
226         IF (IJOB.NE.2) GO TO 9000
          ! MOVE ORIGINAL MATRIX BACK TO A
228         K = NA
          DO 105 I=1,NI2
230             A(I) = WK(K)
              K = K+1
232     105   CONTINUE
          WK(1) = THOUS
234         IF (JER.NE.0) GO TO 9000
          ! COMPUTE 1-NORM OF A
236     110   ANORM = ZERO
          II = 1
238         DO 120 I=1,N
              ASUM = ZERO
240             IL = II
              KK = 2
242             DO 115 L=1,N
                ! ASUM = ASUM+DCABS(DCMPLX(A(IL),A(IL+1)))
244                 ASUM = ASUM+CDABS(DCMPLX(A(IL),A(IL+1)))
                  IF (L.GE.I) KK = L+L
246                 IL = IL+KK
248     115   CONTINUE
          ANORM = DMAX1(ANORM,ASUM)
          II = II+I+I

```

```

250 120 CONTINUE
      IF (ANORM.EQ.ZERO) ANORM = ONE
252 ! COMPUTE PERFORMANCE INDEX
      PI = ZERO
254 DO 135 I=1,N
          II = 1
256          S = ZERO
          SUMZ = ZERO
258          LZ = (IZ+IZ)*(I-1)+1
          LZ = IZ*(I-1)*2+1
260          MZ = LZ
          DO 130 L=1,N
262              LK = II
              KK = 2
264 ! SUMZ = SUMZ+DCABS(DCMPLX(Z(LZ),Z(LZ+1)))
              SUMZ = SUMZ+CDABS(DCMPLX(Z(LZ),Z(LZ+1)))
266              SUMR = -D(I)*Z(LZ)
              SUMI = -D(I)*Z(LZ+1)
268              KZ = MZ
              DO 125 K=1,N
270                  SIGNA = ONE
                  IF (K.GT.L) SIGNA = -ONE
272                  SUMR = SUMR+A(LK)*Z(KZ)-SIGNA*A(LK+1)*Z(KZ+1)
                  SUMI = SUMI+A(LK)*Z(KZ+1)+SIGNA*A(LK+1)*Z(KZ)
274                  IF (K.GE.L) KK = K+K
                  LK = LK+KK
276                  KZ = KZ+2
          125 CONTINUE
278 ! S = S+DCABS(DCMPLX(SUMR,SUMI))
          S = S+CDABS(DCMPLX(SUMR,SUMI))
280          LZ = LZ+2
          II = II+L+L
282 130 CONTINUE
          IF (SUMZ.EQ.ZERO) GO TO 135
284          PI = DMAX1(PI,S/SUMZ)
          135 CONTINUE
286          AN = N
          PI = PI/(ANORM*TEN*AN*RDELP)
288          WK(1) = PI
          IF (JOBN.LT.10) GO TO 9000
290 ! CONVERT BACK TO FULL COMPLEX MODE
          NP1 = N + 1

```

```

292      IJ = (N-1) * NP1
      IJ = IJ + IJ + 2
294      K = N * NP1
      DO 145 JR=1,N
296          J = N+1-JR
          DO 140 IR=1,J
298              A(IJ-1) = A(K-1)
              A(IJ) = -A(K)
300              K = K-2
              IJ = IJ - 2
302      140  CONTINUE
          IJ = IJ - JR - JR
304      145  CONTINUE
          JR = N + N
306          II = 2
          JI = 2
308          DO 155 I=1,N
              IJ = II
310              DO 150 J=1,I
                  A(IJ-1) = A(JI-1)
312                  A(IJ) = -A(JI)
                  JI = JI+2
314                  IJ = IJ+JR
          150  CONTINUE
              JI = JI + JR - I - I
              II = II + 2
318      155  CONTINUE
9000  CONTINUE
320      IF (IER.NE.0) CALL UERTST (IER, 'EIGCH ')
      IF (JER.EQ.0) GO TO 9005
322      IER = JER
      CALL UERTST (IER, 'EIGCH ')
324      9005 RETURN
      END
326  CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      C      EHOUSH      C
328  CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      C  IMSL ROUTINE NAME  - EHOUSH
          EHOH0010C
330  C_____
      C
332  ! COMPUTER - DG7/DOUBLE

```

```

C
334 ! LATEST REVISION - JUNE 1, 1982
C
336 ! PURPOSE - NUCLEUS CALLED ONLY BY IMSL ROUTINE EIGCH
C
338 ! PRECISION/HARDWARE - SINGLE AND DOUBLE/H32
! - DOUBLE/H36,H48,H60
340 C
! REQD. IMSL ROUTINES - NONE REQUIRED
342 C
! NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND
344 ! CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL
! INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP
346 C
! COPYRIGHT - 1982 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.
348 C
! WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN
350 ! APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,
! EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.
352 C
C_____
354 C
      SUBROUTINE EHOUSH (AR, AI, N, D, E, TAU)
356 ! SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS
      INTEGER          N
358      DOUBLE PRECISION  AR(1) , AI(1) , D(1) , E(1) , TAU(2 , 1)
! SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES
360      INTEGER          NM1, NN, I , NR, NRM1, L , INDX, J , JJ , INX1 , INX2 , JP1 ,
      KK,
      *                IX , IM1
362      DOUBLE PRECISION  RHO, TOLER, ZERO, ONE, T1 , T2 , TESTBB, VR, ROOT,
      DELTA,
      *                RATIO, RDELP, Q1 , Q2 , X1 , X2 , TT1 , TT2 , BB
364      DATA              ZERO/0.0D0/ , ONE/1.0D0/
      DATA              RDELP/0.2220446050D-15/
366 ! FIRST EXECUTABLE STATEMENT
      NM1=N-1
368      TOLER=ZERO
      NN=(N*(N+1))/2
370      DO 5  I=1, NN
          T1=DABS(AR(I))
372          T2=DABS(AI(I))

```

```

      IF (T2.GT.T1) T1=T2
374      IF (T1.GT.TOLER) TOLER=T1
      5 CONTINUE
      TESTBB=RDELP*TOLER
376      IF (N.LE.2) GO TO 65
378 ! PERFORM N - 2 SIMILARITY
! TRANSFORMATIONS
      DO 60 NR=2,NM1
380         NRM1=NR-1
382         VR=ZERO
         TAU(1,NR)=ZERO
384         TAU(2,NR)=ZERO
         TAU(2,1)=ZERO
386         DO 10 L=NR,N
            INDX=(L*(L-1))/2+NRM1
388             VR=AR(INDX)**2+AI(INDX)**2+VR
      10 CONTINUE
      INDX=(NR*NRM1)/2+NRM1
      IF ((TESTBB)**2 .GE. VR) GO TO 60
392 ! ROOT = DCABS(DCMPLX(AR(INDX),AI(INDX)))*DSQRT(VR)
      ROOT = CDABS(DCMPLX(AR(INDX),AI(INDX)))*DSQRT(VR)
394      IF (ROOT.NE.ZERO) GO TO 15
      AR(INDX)=DSQRT(VR)
396      DELTA=VR
      TAU(1,1)=-AR(INDX)
398      GO TO 20
      15 DELTA=VR+ROOT
      RATIO=VR/ROOT
      TAU(1,1)=-RATIO*AR(INDX)
400      TAU(2,1)= RATIO*AI(INDX)
      AR(INDX)=(RATIO+ONE)*AR(INDX)
402      AI(INDX)=(RATIO+ONE)*AI(INDX)
404 ! THE MATRIX TO BE USED IN THE
406 ! SIMILARITY TRANSFORMATION HAS
! BEEN DETERMINED. THE TRANSFOR-
408 ! MATION FOLLOWS
      20 DO 35 J=NR,N
410         JJ=(J*(J-1))/2
         INDX=JJ+NRM1
412         TAU(1,J)=AR(INDX)/DELTA
         TAU(2,J)=AI(INDX)/DELTA
414         D(J)=ZERO

```



```

E(J)=ZERO
416 DO 25 L=NR, J
      INX1=(L*(L-1))/2+NRM1
418      INX2=JJ+L
      D(J)= D(J)+AR(INX2)*AR(INX1)-AI(INX2)*AI(INX1)
420      E(J)= E(J)+AR(INX2)*AI(INX1)+AI(INX2)*AR(INX1)
25 CONTINUE
422      JP1=J+1
      IF (JP1 .GT. N) GO TO 40
424 DO 30 L=JP1, N
      KK=(L*(L-1))/2
426      INX1=KK+NRM1
      INX2=KK+J
428      D(J)=D(J)+AR(INX2)*AR(INX1)+AI(INX2)*AI(INX1)
      E(J)=E(J)+AR(INX2)*AI(INX1)-AI(INX2)*AR(INX1)
430 30 CONTINUE
432 35 CONTINUE
40 RHO=ZERO
DO 45 L=NR, N
434      RHO=RHO+D(L)*TAU(1, L)+E(L)*TAU(2, L)
45 CONTINUE
436      IX=(NRM1*(NR-2))/2
DO 55 I=NR, N
438      IX=IX+I-1
      INX2=IX+NRM1
440 DO 50 J=NR, I
      INX1=IX+J
442      X1=TAU(1, I)*D(J)+TAU(2, I)*E(J)
      X2=TAU(2, I)*D(J)-TAU(1, I)*E(J)
444      Q1=D(I)-RHO*AR(INX2)
      Q2=E(I)-RHO*AI(INX2)
446      T1=Q1*TAU(1, J)+Q2*TAU(2, J)
      T2=Q2*TAU(1, J)-Q1*TAU(2, J)
448      AR(INX1)=AR(INX1)-X1-T1
      AI(INX1)=AI(INX1)-X2-T2
450 50 CONTINUE
55 CONTINUE
452      TAU(1, NR)=TAU(1, 1)
      TAU(2, NR)=TAU(2, 1)
454 60 CONTINUE

```

! THE MATRIX HAS BEEN REDUCED TO TRI-

! DIAGONAL HERMITIAN FORM. THE SUB-


```
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
500 ! IMSL ROUTINE NAME - EQRT2S EQRT0010C
C _____
502 C
! COMPUTER - DG7/DOUBLE
504 C
! LATEST REVISION - NOVEMBER 1, 1984
506 C
! PURPOSE - EIGENVALUES AND (OPTIONALLY) EIGENVECTORS OF
508 ! A SYMMETRIC TRIDIAGONAL MATRIX USING THE
! QL METHOD.
510 C
! USAGE - CALL EQRT2S (D,E,N,Z,IZ,IER)
512 C
! ARGUMENTS D - ON INPUT, THE VECTOR D OF LENGTH N CONTAINS
514 ! THE DIAGONAL ELEMENTS OF THE SYMMETRIC
! TRIDIAGONAL MATRIX T.
516 ! ON OUTPUT, D CONTAINS THE EIGENVALUES OF
! T IN ASCENDING ORDER.
518 ! E - ON INPUT, THE VECTOR E OF LENGTH N CONTAINS
! THE SUB-DIAGONAL ELEMENTS OF T IN POSITION
520 ! 2,...,N. ON OUTPUT, E IS DESTROYED.
! N - ORDER OF TRIDIAGONAL MATRIX T.(INPUT)
522 ! Z - ON INPUT, Z CONTAINS THE IDENTITY MATRIX OF
! ORDER N.
524 ! ON OUTPUT, Z CONTAINS THE EIGENVECTORS
! OF T. THE EIGENVECTOR IN COLUMN J OF Z
526 ! CORRESPONDS TO THE EIGENVALUE D(J).
! IZ - INPUT ROW DIMENSION OF MATRIX Z EXACTLY AS
528 ! SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT IN THE
! CALLING PROGRAM. IF IZ IS LESS THAN N, THE
530 ! EIGENVECTORS ARE NOT COMPUTED. IN THIS CASE
! Z IS NOT USED.
532 ! IER - ERROR PARAMETER
! TERMINAL ERROR
534 ! IER = 128+J, INDICATES THAT EQRT2S FAILED
! TO CONVERGE ON EIGENVALUE J. EIGENVALUES
536 ! AND EIGENVECTORS 1,...,J-1 HAVE BEEN
! COMPUTED CORRECTLY, BUT THE EIGENVALUES
538 ! ARE UNORDERED.
C
540 ! PRECISION/HARDWARE - SINGLE AND DOUBLE/H32
```

```

! - SINGLE/H36,H48,H60
542 C
! REQD. IMSL ROUTINES - UERTST,UGETIO
544 C
! NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND
546 ! CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL
! INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP
548 C
! COPYRIGHT - 1978 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.
550 C
! WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN
552 ! APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,
! EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.
554 C
C_____
556 C
      SUBROUTINE EQRT2S (D,E,N,Z, IZ ,IER)
558 C
      INTEGER IER , II , IP1 , IZ , I , J , K , L , L1 , M , MM1 , MM1PL , N
560      DIMENSION      D(1) , E(1) , Z( IZ , 1)
      DOUBLE PRECISION D , E , Z , B , C , F , G , H , P , R , S , RDELPH , ONE , ZERO
562      DATA          RDELPH / 0.2220446050D-15 /
      DATA          ZERO , ONE / 0.0D0 , 1.0D0 /
564 ! MOVE THE LAST N-1 ELEMENTS
! OF E INTO THE FIRST N-1 LOCATIONS
566 ! FIRST EXECUTABLE STATEMENT
      IER = 0
568      IF (N .EQ. 1) GO TO 9005
      DO 5 I=2,N
570          E(I-1) = E(I)
      5 CONTINUE
572      E(N) = ZERO
      B = ZERO
574      F = ZERO
      DO 60 L=1,N
576          J = 0
          H = RDELPH*(DABS(D(L))+DABS(E(L)))
578          IF (B.LT.H) B = H
! LOOK FOR SMALL SUB-DIAGONAL ELEMENT
580          DO 10 M=L,N
              K=M
582          IF (DABS(E(K)) .LE. B) GO TO 15

```

```

10    CONTINUE
584  15    M = K
        IF (M.EQ.L) GO TO 55
586  20    IF (J .EQ. 30) GO TO 85
        J = J+1
588        L1 = L+1
        G = D(L)
590        P = (D(L1)-G)/(E(L)+E(L))
        R = DABS(P)
592        IF (RDELP*DABS(P) .LT. 1.0D0) R = DSQRT(P*P+ONE)
        D(L) = E(L)/(P+DSIGN(R,P))
594        H = G-D(L)
        DO 25 I = L1,N
596            D(I) = D(I)-H
    25    CONTINUE
598        F = F+H
! QL TRANSFORMATION
600        P = D(M)
        C = ONE
602        S = ZERO
        MM1 = M-1
604        MMIPL = MM1+L
        IF (L.GT.MM1) GO TO 50
606        DO 45 II=L,MM1
            I = MMIPL-II
608            G = C*E(I)
            H = C*P
610            IF (DABS(P) .LT. DABS(E(I))) GO TO 30
            C = E(I)/P
612            R = DSQRT(C*C+ONE)
            E(I+1) = S*P*R
614            S = C/R
            C = ONE/R
616            GO TO 35
    30    C = P/E(I)
618            R = DSQRT(C*C+ONE)
            E(I+1) = S*E(I)*R
620            S = ONE/R
            C = C*S
622    35    P = C*D(I)-S*G
            D(I+1) = H+S*(C*G+S*D(I))
624            IF (IZ .LT. N) GO TO 45

```



```
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
668 ! IMSL ROUTINE NAME - UERTST UERT0010C
C _____
670 C
! COMPUTER - DG7/SINGLE
672 C
! LATEST REVISION - JUNE 1, 1982
674 C
! PURPOSE - PRINT A MESSAGE REFLECTING AN ERROR CONDITION
676 C
! USAGE - CALL UERTST (IER,NAME)
678 C
! ARGUMENTS IER - ERROR PARAMETER. (INPUT)
680 ! IER = I+J WHERE
! I = 128 IMPLIES TERMINAL ERROR MESSAGE,
682 ! I = 64 IMPLIES WARNING WITH FIX MESSAGE,
! I = 32 IMPLIES WARNING MESSAGE.
684 ! J = ERROR CODE RELEVANT TO CALLING
! ROUTINE.
686 ! NAME - A CHARACTER STRING OF LENGTH SIX PROVIDING
! THE NAME OF THE CALLING ROUTINE. (INPUT)
688 C
! PRECISION/HARDWARE - SINGLE/ALL
690 C
! REQD. IMSL ROUTINES - UGETIO,USPKD
692 C
! NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND
694 ! CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL
! INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP
696 C
! REMARKS THE ERROR MESSAGE PRODUCED BY UERTST IS WRITTEN
698 ! TO THE STANDARD OUTPUT UNIT. THE OUTPUT UNIT
! NUMBER CAN BE DETERMINED BY CALLING UGETIO AS
700 ! FOLLOWS.. CALL UGETIO(1,NIN,NOUT).
! THE OUTPUT UNIT NUMBER CAN BE CHANGED BY CALLING
702 ! UGETIO AS FOLLOWS..
! NIN = 0
704 ! NOUT = NEW OUTPUT UNIT NUMBER
! CALL UGETIO(3,NIN,NOUT)
706 ! SEE THE UGETIO DOCUMENT FOR MORE DETAILS.
C
708 ! COPYRIGHT - 1982 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.
```

```

C
710 ! WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN
! APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,
712 ! EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.
C
714 C_____
C
716     SUBROUTINE UERTST (IER ,NAME)
! SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS
718     INTEGER          IER
! CHARACTER NAME*(*)
720 ! SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES
     INTEGER          I ,IEQ ,IEQDF ,IOUNIT ,LEVEL ,LEVOLD ,NAMEQ(6) ,
722     *                NAMSET(6) ,NAMUPK(6) ,NIN ,NMTB ,NAME(6)
     DATA             NAMSET/1HU,1HE,1HR,1HS,1HE,1HT/
724     DATA             NAMEQ/6*1H /
     DATA             LEVEL/4/ ,IEQDF/0/ ,IEQ/1H=/
726 ! UNPACK NAME INTO NAME
! FIRST EXECUTABLE STATEMENT
728 ! CALL USP KD (NAME,6,NAMUPK,NMTB)
! GET OUTPUT UNIT NUMBER
730     CALL UGETIO(1 ,NIN ,IOUNIT)
! CHECK IER
732     IF (IER.GT.999) GO TO 25
     IF (IER.LT.-32) GO TO 55
734     IF (IER.LE.128) GO TO 5
     IF (LEVEL.LT.1) GO TO 30
736 ! PRINT TERMINAL MESSAGE
     IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT ,35) IER ,NAMEQ ,IEQ ,NAME
738     IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT ,35) IER ,NAME
     GO TO 30
740     5 IF (IER.LE.64) GO TO 10
     IF (LEVEL.LT.2) GO TO 30
742 ! PRINT WARNING WITH FIX MESSAGE
     IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT ,40) IER ,NAMEQ ,IEQ ,NAME
744     IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT ,40) IER ,NAME
     GO TO 30
746     10 IF (IER.LE.32) GO TO 15
! PRINT WARNING MESSAGE
748     IF (LEVEL.LT.3) GO TO 30
     IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT ,45) IER ,NAMEQ ,IEQ ,NAME
750     IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT ,45) IER ,NAME

```



```

      GO TO 30
752  15 CONTINUE
      ! CHECK FOR UERSET CALL
754      DO 20 I=1,6
          IF (NAME(I) .NE. NAMSET(I)) GO TO 25
756  20 CONTINUE
          LEVOLD = LEVEL
758          LEVEL = IER
          IER = LEVOLD
760          IF (LEVEL.LT.0) LEVEL = 4
          IF (LEVEL.GT.4) LEVEL = 4
762          GO TO 30
      25 CONTINUE
764          IF (LEVEL.LT.4) GO TO 30
      ! PRINT NON-DEFINED MESSAGE
766          IF (IEQDF.EQ.1) WRITE(IOUNIT,50) IER,NAMEQ,IEQ,NAME
          IF (IEQDF.EQ.0) WRITE(IOUNIT,50) IER,NAME
768  30 IEQDF = 0
          RETURN
770  35 FORMAT(19H *** TERMINAL ERROR,10X,7H( IER = ,I3 ,
      1      20H) FROM IMSL ROUTINE ,6A1,A1,6A1)
772  40 FORMAT(27H *** WARNING WITH FIX ERROR,2X,7H( IER = ,I3 ,
      1      20H) FROM IMSL ROUTINE ,6A1,A1,6A1)
774  45 FORMAT(18H *** WARNING ERROR,11X,7H( IER = ,I3 ,
      1      20H) FROM IMSL ROUTINE ,6A1,A1,6A1)
776  50 FORMAT(20H *** UNDEFINED ERROR,9X,7H( IER = ,I5 ,
      1      20H) FROM IMSL ROUTINE ,6A1,A1,6A1)
778 C
      ! SAVE P FOR P = R CASE
780 ! P IS THE PAGE NAME
      ! R IS THE ROUTINE NAME
782  55 IEQDF = 1
          DO 60 I=1,6
784  60 NAMEQ(I) = NAME(I)
          65 RETURN
786  END
C
788 C UGETIO C
790 C UGETIO C
      ! IMSL ROUTINE NAME - UGETIO UGET0010C
792 C _____

```

```
C
794 ! COMPUTER - DG7/SINGLE
C
796 ! LATEST REVISION - JUNE 1, 1981
C
798 ! PURPOSE - TO RETRIEVE CURRENT VALUES AND TO SET NEW
! VALUES FOR INPUT AND OUTPUT UNIT
800 ! IDENTIFIERS.
C
802 ! USAGE - CALL UGETIO(IOPT,NIN,NOUT)
C
804 ! ARGUMENTS IOPT - OPTION PARAMETER. (INPUT)
! IF IOPT=1, THE CURRENT INPUT AND OUTPUT
806 ! UNIT IDENTIFIER VALUES ARE RETURNED IN NIN
! AND NOUT, RESPECTIVELY.
808 ! IF IOPT=2, THE INTERNAL VALUE OF NIN IS
! RESET FOR SUBSEQUENT USE.
810 ! IF IOPT=3, THE INTERNAL VALUE OF NOUT IS
! RESET FOR SUBSEQUENT USE.
812 ! NIN - INPUT UNIT IDENTIFIER.
! OUTPUT IF IOPT=1, INPUT IF IOPT=2.
814 ! NOUT - OUTPUT UNIT IDENTIFIER.
! OUTPUT IF IOPT=1, INPUT IF IOPT=3.
816 C
! PRECISION/HARDWARE - SINGLE/ALL
818 C
! REQD. IMSL ROUTINES - NONE REQUIRED
820 C
! NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND
822 ! CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL
! INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP
824 C
! REMARKS EACH IMSL ROUTINE THAT PERFORMS INPUT AND/OR OUTPUT
826 ! OPERATIONS CALLS UGETIO TO OBTAIN THE CURRENT UNIT
! IDENTIFIER VALUES. IF UGETIO IS CALLED WITH IOPT=2 OR
828 ! IOPT=3, NEW UNIT IDENTIFIER VALUES ARE ESTABLISHED.
! SUBSEQUENT INPUT/OUTPUT IS PERFORMED ON THE NEW UNITS.
830 C
! COPYRIGHT - 1978 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.
832 C
! WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN
834 ! APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,
```

```

! EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.
836 C
C_____
838 C
      SUBROUTINE UGETIO(IOPT ,NIN ,NOUT)
840 ! SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS
      INTEGER          IOPT ,NIN ,NOUT
842 ! SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES
      INTEGER          NIND ,NOUTD
844      DATA           NIND/9/ ,NOUTD/12/
! FIRST EXECUTABLE STATEMENT
846      IF (IOPT.EQ.3) GO TO 10
      IF (IOPT.EQ.2) GO TO 5
848      IF (IOPT.NE.1) GO TO 9005
      NIN = NIND
850      NOUT = NOUTD
      GO TO 9005
852      5 NIND = NIN
      GO TO 9005
854      10 NOUTD = NOUT
      9005 RETURN
856      END
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
858 ! EHBCKH C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
860 ! IMSL ROUTINE NAME - EHBCKH EHBH0010C
C_____
862 C
! COMPUTER - DG7/DOUBLE
864 C
! LATEST REVISION - JUNE 1, 1982
866 C
! PURPOSE - NUCLEUS CALLED ONLY BY IMSL ROUTINE EIGCH
868 C
! PRECISION/HARDWARE - SINGLE AND DOUBLE/H32
870 ! - DOUBLE/H36,H48,H60
C
872 ! REQD. IMSL ROUTINES - NONE REQUIRED
C
874 ! NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND
! CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL
876 ! INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP

```

```

C
878 ! COPYRIGHT - 1982 BY IMSL, INC. ALL RIGHTS RESERVED.
C
880 ! WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN
! APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY,
882 ! EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.
C
884 C_____
C
886     SUBROUTINE EHBCKH (AR, AI,TAU,N,ZR, ZI , IZ)
! SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS
888     INTEGER           N, IZ
     DOUBLE PRECISION  AR(1) , AI(1) ,TAU( 2 ,1) ,ZR( IZ ,1) , ZI( IZ ,1)
890 ! SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES
     INTEGER           J ,K,NR,L ,NRM1, INX1 , INX2 , K1
892     DOUBLE PRECISION DELTA,ZERO, ALPHA1, ALPHA2
     DATA              ZERO/0.0D0/
894 ! TRANSFORM THE EIGENVECTORS OF THE
! REAL SYMMETRIC TRIDIAGONAL MATRIX
896 ! TO THOSE OF THE HERMITIAN TRIDIA-
! GONAL MATRIX
898 ! FIRST EXECUTABLE STATEMENT
     DO 5 J=1,N
900         DO 5 K=1,N
             ZI ( J ,K)=-ZR( J ,K)*TAU( 2 , J)
902             ZR( J ,K)=ZR( J ,K)*TAU( 1 , J)
     5 CONTINUE
904     IF ( N .LE. 2) GO TO 30
! RECOVER THE HOUSEHOLDER MATRICES IN
906 ! REVERSE ORDER
     DO 25 L=3,N
908         NR=N-L+2
         NRM1=NR-1
910         INX1=(NR*(NRM1))/2+NR
         INX2=INX1-1
912         IF ( AI( INX1) .EQ. ZERO) GO TO 25
         DELTA=AI( INX1) * DSQRT( AR( INX2) **2+AI( INX2) **2)
914         DO 20 J=1,N
             ALPHA1=ZERO
916             ALPHA2=ZERO
         DO 10 K=NR,N
             K1=(K*(K-1))/2+NRM1
918

```

```

          ALPHA1=ALPHA1+AR(K1)*ZR(K, J)+AI(K1)*ZI(K, J)
          ALPHA2=ALPHA2-AI(K1)*ZR(K, J)+AR(K1)*ZI(K, J)
920
10      CONTINUE
          ALPHA1=ALPHA1/DELTA
          ALPHA2=ALPHA2/DELTA
922
          DO 15 K=NR, N
          K1=(K*(K-1))/2+NRM1
          ZR(K, J)=ZR(K, J)-AR(K1)*ALPHA1+AI(K1)*ALPHA2
          ZI(K, J)=ZI(K, J)-AR(K1)*ALPHA2-AI(K1)*ALPHA1
924
15      CONTINUE
20      CONTINUE
25      CONTINUE
30      RETURN
926
          END
928
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
930 C                      C
932 CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
934

```

eigch.f

B.2. Superficies isoenergéticas

Para el cálculo de de las bandas de energía en un plano (X,Y,0) se ha escrito un programa en fortran que se encarga de leer los parametros del AsGa necesarios y de calcular los valores de energía para cada banda para puntos del plano (X,Y,0) y escribe los resultados en archivos para posteriormente poder hacer una representación tridimensional de las bandas y una representación de líneas isoenergéticas mediante el programa *Mathematica*.

A continuación se presenta el código fuente utilizado para el cálculo de las bandas de energía para el caso $H_{4 \times 4}$. Para los demás casos el programa es totalmente análogo pero teniendo en cuenta que la dimensión del hamiltoniano cambia y que la subrutina de construcción del hamiltoniano es distinta en cada caso y se deben incluir además los parámetros referentes a la interacción espín-órbita en el caso de los hamiltonianos $H_{8 \times 8}$, $H_{8 \times 8(kpi)}$ y $H_{14 \times 14}$.

B.2.1. Programa principal

```

1  !Calcula las diferentes bandas de energía para el plano (X,Y,0)
   PROGRAM isoener
3
   ! Declaración de VARIABLES
5  IMPLICIT NONE
7
   INTEGER :: i , ip , jp !Índices DO
9
   INTEGER :: ndim !Dimensión de la matriz hamiltoniana
   PARAMETER (ndim=4)
11
   ! Parámetros subrutina de diagonalización (EIGCH)
13  INTEGER :: IW
   PARAMETER (IW=ndim)
15  INTEGER :: IJOB , IER
   PARAMETER(IJOB=12)
17
   INTEGER :: np ! Número de puntos
19
   ! Área de trabajo en subrutina de diagonalizacion (EIGCH)
21  REAL(KIND(0.0D0)) :: WKD(2*IW*IW+4*IW)

```

```

23  !Coordenadas cartesianas del vector de onda
REAL(KIND(0.0D0)) :: KX, KY, KZ
25  !Pasos de las variables
REAL(KIND(0.0D0)) :: pasox , pasoy ,PK
27  !Valores propios
REAL(KIND(0.0D0)) :: AVS(ndim)
29  !Matriz hamiltoniana
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: HKP(ndim , ndim)
31  !Vectores propios
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: AUFS(ndim , ndim)
33  !Parámetros del AsGa
REAL(KIND(0.0D0)) :: E0, E1, P0, P1, Q, a , g1 , g2 , g3
35  !Valores inicial y final de los parámetros x e y
REAL(KIND(0.0D0)) :: xi , xf
37  REAL(KIND(0.0D0)) :: yi , yf

39 ! Leo los parámetros de entrada del archivo
OPEN(11 ,FILE='datos.dat') !Abro el fichero de entrada
41  READ(11 ,*) E0 !Energía de los estados  $s_c$ 
43  READ(11 ,*) E1 !Energía de los estados  $p_c$ 
45  READ(11 ,*) P0 !Parámetro P
47  READ(11 ,*) P1 !Parámetro P'
49  READ(11 ,*) Q !Parámetro Q
51  READ(11 ,*) g1 !Parámetros de Luttinger
53  READ(11 ,*) g2
55  READ(11 ,*) g3
57  READ(11 ,*) a !Constante de red
CLOSE(11)

!Abro los ficheros de salida
OPEN(12 ,FILE='banda1.dat')
OPEN(13 ,FILE='banda2.dat')
OPEN(14 ,FILE='banda3.dat')
OPEN(15 ,FILE='banda4.dat')

57 ! CONSTRUCCIÓN y DIAGONALIZACIÓN a lo largo del plano (X,Y,0)
59 xi=-0.2d0 !x inicial
xf=0.2d0 !x final
61 yi=-0.2d0 !y inicial
yf=0.2d0 !y final

63 KX= 0.0d0

```

```

65  KY= 0.0d0
    KZ= 0.0d0
67
    pasox= (xf-xi)/np
69  pasoy= (yf-yi)/np
71  DO jp=0,np
    KY= yi + jp*pasoy
73  DO ip= 0,np
    KX= xi + ip*pasox
75  !Subrutina de CONSTRUCCIÓN
    CALL HAMKP(KX,KY,KZ,HKP,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,a,ndim)
77  !Subrutina de DIAGONALIZACIÓN
    CALL EIGCH(HKP,ndim,IJOB,AVS,AUFS,ndim,WKD,IER)
79  WRITE (12,20) KX,KY,AVS(1)
    WRITE (13,20) KX,KY,AVS(2)
81  WRITE (14,20) KX,KY,AVS(3)
    WRITE (15,20) KX,KY,AVS(4)
83  END DO
    END DO
85
20  FORMAT(1x,10(E14.7,1x))
87
    CLOSE(12)
89  CLOSE(13)
    CLOSE(14)
91  CLOSE(15)
93
    STOP
    END PROGRAM isoener

```

3D.f

B.3. Masas efectivas en el punto Γ

B.3.1. Programa principal

```

!Calcula el tensor de masa efectiva en el punto Gamma
2  PROGRAM progmasas
4  !Declaración de VARIABLES

```



```

IMPLICIT NONE
6
  !Función que calcula el autovalor correspondiente a la banda
8 EXTERNAL:: AUTOVAL1
10 INTEGER :: i , j , k !Índices
12
  !Dimensión de la matriz hamiltoniana
INTEGER :: ndim
14 PARAMETER (ndim=4)
16
  !Parámetros subrutina de diagonalizacion (EIGCH)
INTEGER :: IW
18 PARAMETER (IW=ndim)
INTEGER :: IJOB, IER
20
  !Índice de la banda y dimension del tensor de masa
22 INTEGER :: IB, N1
PARAMETER (N1=3)
24
  !Para ajustar las unidades
26 REAL(KIND(0.0D0)) :: UNI, UNI2
PARAMETER (UNI2=301.544)
28
  !Coordenadas del vector K
30 REAL(KIND(0.0D0)) :: KX, KY, KZ
REAL(KIND(0.0D0)) :: AVS(ndim)
32
  !Valores propios
REAL(KIND(0.0D0)) :: AUTOVAL1
34
  !Matrices para el tensor de masas
36 REAL(KIND(0.0d0)) :: DB(3,3), DM(3,3), DPM(3), DMV(3)
38
  !Vectores propios
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: AUFS(ndim, ndim)
40
  !Matriz hamiltoniana
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: HKP(ndim, ndim)
42
  !Parámetros del AsGa
REAL(KIND(0.0d0)) :: E0, E1, P0, P1, Q, a, g1, g2, g3
44
COMMON E0, E1, P0, P1, Q, a, g1, g2, g3, IB
46

```

```
! Leo los parámetros de entrada del archivo
48 OPEN(11,FILE='datos.dat') !Abro el fichero de entrada
    READ(11,*) E0 !Energía de los estados  $s_c$ 
50    READ(11,*) E1 !Energía de los estados  $p_c$ 
    READ(11,*) P0 !Parámetro P
52    READ(11,*) P1 !Parámetro P'
    READ(11,*) Q !Parámetro Q
54    READ(11,*) g1 !Parámetros de Luttinger
    READ(11,*) g2
56    READ(11,*) g3
    READ(11,*) a !Constante de red
58 CLOSE(11)

60 UNI=UNI2/(a**2)

62 IJOB = 12

64 !Abro el fichero de resultados
    OPEN(12,FILE='masas.dat',STATUS='UNKNOWN')
66

! CÁLCULO DEL TENSOR DE MASAS EFECTIVA
68 DO k=1,ndim
    IB= k
70
    KX= 0.0d0
72    KY= 0.0d0
    KZ= 0.0d0
74
    !SUBROUTINA de cálculo de derivadas
76    !(Devuelve el tensor de masas diagonal DMV)
    CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)
78
    !ESCRITURA DE RESULTADOS
80    WRITE(12,10) (UNI*1.d0/DMV(j),j=1,N1)

82 END DO

84 10 FORMAT(1X,160(F12.7,1x))

86 CLOSE(12)

88 STOP
```

```

END PROGRAM progmasas
90
! _____
92
! FUNCIÓN DE CÁLCULO DE AUTOVALORES
94 ! Esta es la función que se deriva para obtener
! el tensor de masa efectiva
96
FUNCTION AUTOVAL1(KX,KY,KZ)
98
IMPLICIT NONE
100
INTEGER :: IB , ndim
102 INTEGER :: IJOB , IER , IW
PARAMETER(IW=32)
104 PARAMETER(ndim=4)
106
REAL(KIND(0.0D0)) :: AUTOVAL1
108
REAL(KIND(0.0D0)) :: WKD(2*IW*IW+4*IW)
REAL(KIND(0.0D0)) :: KX,KY,KZ
110 REAL(KIND(0.0D0)) :: AVS(ndim)
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: AUFS(ndim , ndim)
112 COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: HKP(ndim , ndim)
!Parámetros del AsGa
114 REAL(KIND(0.0D0)) :: E0 , E1 , P0 , P1 , Q , a , g1 , g2 , g3
116
COMMON E0 , E1 , P0 , P1 , Q , a , g1 , g2 , g3 , IB
118
IJOB= 12
! Construye y diagonaliza el hamiltoniano
120 CALL HAMKP(KX,KY,KZ,HKP,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,a,ndim)
CALL EIGCH(HKP,ndim,IJOB,AVS,AUFS,ndim,WKD,IER)
122 !Devuelve el valor de energía
! correspondiente a la banda IB
124 AUTOVAL1= AVS(IB)
126
RETURN
END FUNCTION AUTOVAL1

```

B.3.2. Subrutina DERIVPAP

Esta subrutina calcula el tensor de masa efectiva y lo diagonaliza haciendo uso de la función DERIVATED para el cálculo de las derivadas segundas y las derivadas cruzadas.

```

1  SUBROUTINE DERIVPAP(A1D,A2D,A3D,DBASS,DMASS,DPMASS,DMASSV)
3
5  INTEGER N1,N2,JOBN
7  REAL H1
9  PARAMETER (H1=0.001,N2=3,N1=(N2*(N2+1)/2)+N2,JOBN=12) ! Parámetros
   de la subrutina
11 EXTERNAL AUTOVAL1, DERIVATED
13 INTEGER IER,I,J
15 REAL*8 ERR,DERIVATED
17 REAL*8 DMASS(N2,N2),DBASS(N2,N2),WZ(N1),DPMASS(N2)
19 REAL*8 DMASSV(N2),DT(N2,N2),D1(N2,N2),DPM(N2)
21 REAL*8 AUTOVAL1
23 REAL*8 A1D,A2D,A3D
25 REAL A1,A2,A3
27
29 A1= SNGL(A1D) ! Se realiza un cambio de precisión, dado que DERIVATED
   trabaja en precisión sencilla.
31 A2= SNGL(A2D)
33 A3= SNGL(A3D)
35
   ! Derivadas primeras
37
39 DPMASS(1)=DERIVATED(1,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
41 DPMASS(2)=DERIVATED(2,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
43 DPMASS(3)=DERIVATED(3,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
45
   ! Derivadas segundas
47
49
51 DMASS(1,1)=DERIVATED(4,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
53 DMASS(2,2)=DERIVATED(5,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
55 DMASS(3,3)=DERIVATED(6,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
57
   ! Derivadas cruzadas
59
61 DMASS(1,2)=DERIVATED(7,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)

```

```

37  DMASS(1,3)=DERIVATIVED(8,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
    DMASS(2,3)=DERIVATIVED(9,AUTOVAL1,A1,A2,A3,H1,ERR)
39
    DO I=2,N2    ! Cálculo del triángulo inferior de la matriz
41      DO J=1,I-1
        DMASS(I,J)=DMASS(J,I)
43      END DO
    END DO
45
! DIAGONALIZACIÓN DE LA MATRIZ
47
    CALL EIGRS(DMASS,N2,JOBN,DMASSV,DBASS,N2,WZ,IER)
49
    CALL TRASPUESTAD(DBASS,DT)
51    CALL PROD1D(DBASS,DPMASS,DPM)
    CALL PRODD(DT,DMASS,D1)
53    CALL PRODD(D1,DBASS,DMASS)

55    DO I=1,N2
        DPMASS(I)=DPM(I)
57    END DO
    RETURN
59    END

61
! ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
63 ! ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
    SUBROUTINE INVERSED(A,IA)
65 ! ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
! ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
67
! Calcula la inversa de una matriz 3*3
69
    INTEGER N
71    PARAMETER (N=3)

73    REAL*8 A(N,N),IA(N,N),DETERMINANTE,DET

75    DET=DETERMINANTE(A)
    IF (DET.EQ.0.0D0) PAUSE ' esta matriz no tiene inversa '
77    DET=1.0D0/DET

```



```

163         END DO
        END DO
165     END DO

167     RETURN
    END

169
171 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
171 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
    SUBROUTINE PROD1D(A,B,AB)
173 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
173 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
175
175 ! Calcula el producto del un vector por una matriz
177
177     INTEGER N
179     PARAMETER (N=3)
179     DOUBLE PRECISION A(N,N) ,B(N) ,AB(N)
181     INTEGER J , I

183     DO I=1,N
183         AB(I)=0.0D0
185     END DO

187     DO I=1,N
187         DO J=1,N
189             AB(I)=AB(I)+A(I , J) *B(J)
189         END DO
191     END DO

193     RETURN
    END

195
197 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
197 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
199     SUBROUTINE SUBDBASS(DB)
199 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
201 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

203     INTEGER N, INIT
203     PARAMETER(N=3,INIT=9)

```



```

205  INTEGER I , J
      REAL A(N,N) ,MOD
207  REAL*8 DB(N,N)
      OPEN(INIT ,FILE='dbass.ini' ,STATUS= 'UNKNOWN' )
209  READ(INIT ,*) ((A(I , J) ,J=1,N) , I=1,N)
      DO I=1,N
211      MOD=(A(I , 1) **2+A(I , 2) **2+A(I , 3) **2) **.5
          DO J=1,N
213      DB(J , I)=DBLE(A(I , J) ) /DBLE(MOD)
          END DO
215  END DO
      CLOSE(INIT)
217  RETURN
      END

```

derivpap.f

B.3.3. Función DERIVATED

```

!cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
2 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
! UNIVERSIDAD DE SALAMANCA 9-I-1994
4 !
! DEPARTAMENTO DE FISICA APLICA
6 ! AREA DE LA MATERIA CONDENSADA
!
8 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
!cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
10
FUNCTION DERIVATED(TYPE,FUN, X1 , Y1 , Z1 ,H,ERR)
12
!cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
14 !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

16 INTEGER NTAB,TYPE
REAL*8 CON,CON2,BIG ,SAFE
18 PARAMETER (CON=1.4D0 ,CON2=CON*CON, BIG=1.0D30 ,NTAB=10)
PARAMETER (SAFE=2.0D0)
20 EXTERNAL FUN
REAL X1 , Y1 , Z1 ,H
22 DOUBLE PRECISION FUN, X, Y, Z ,DERIVATED,ERR
DOUBLE PRECISION FAC,HH,A(NTAB,NTAB) ,ERRT

```

```

24  INTEGER I , J
    X=DBLE(X1)
26  Y=DBLE(Y1)
    Z=DBLE(Z1)
28  IF(H.EQ.0.0) PAUSE ' h must be nomzero in derivative '
    IF((TYPE.LT.1) .OR. (TYPE.GT.9)) PAUSE ' type mismatch '
30  HH=DBLE(H)
    GO TO (9,1,2,3,4,5,6,7,8) TYPE
32  9 A(1,1)=FUN(X+HH,Y,Z)-FUN(X-HH,Y,Z)
    A(1,1)=A(1,1)/(2.0D0*HH)
34  GO TO 20
    1 A(1,1)=FUN(X,Y+HH,Z)-FUN(X,Y-HH,Z)
36  A(1,1)=A(1,1)/(2.0D0*HH)
    GO TO 20
38  2 A(1,1)=FUN(X,Y,Z+HH)-FUN(X,Y,Z-HH)
    A(1,1)=A(1,1)/(2.0D0*HH)
40  GO TO 20
42  3 A(1,1)=FUN(X+HH,Y,Z)+FUN(X-HH,Y,Z) -2.0D0*FUN(X,Y,Z)
    A(1,1)=A(1,1)/(HH*HH)
44  GO TO 20
46  4 A(1,1)=FUN(X,Y+HH,Z)+FUN(X,Y-HH,Z) -2.0D0*FUN(X,Y,Z)
    A(1,1)=A(1,1)/(HH*HH)
48  GO TO 20
50  5 A(1,1)=FUN(X,Y,Z+HH)+FUN(X,Y,Z-HH) -2.0D0*FUN(X,Y,Z)
    A(1,1)=A(1,1)/(HH*HH)
52  GO TO 20
54  6 A(1,1)=FUN(X+HH,Y+HH,Z)+FUN(X-HH,Y-HH,Z)
    A(1,1)=A(1,1)-FUN(X-HH,Y+HH,Z)-FUN(X+HH,Y-HH,Z)
56  A(1,1)=A(1,1)/(4.0D0*HH*HH)
    GO TO 20
58  7 A(1,1)=FUN(X+HH,Y,Z+HH)+FUN(X-HH,Y,Z-HH)
    A(1,1)=A(1,1)-FUN(X-HH,Y,Z+HH)-FUN(X+HH,Y,Z-HH)
60  A(1,1)=A(1,1)/(4.0D0*HH*HH)
    GO TO 20
62  8 A(1,1)=FUN(X,Y+HH,Z+HH)+FUN(X,Y-HH,Z-HH)
    A(1,1)=A(1,1)-FUN(X,Y+HH,Z-HH)-FUN(X,Y-HH,Z+HH)
64  A(1,1)=A(1,1)/(4.0D0*HH*HH)
    20  ERR=BIG
    DO I=2,NTAB
        HH=HH/CON
    GO TO (10,11,12,13,14,15,16,17,18) TYPE
10  A(1,I)=FUN(X+HH,Y,Z)-FUN(X-HH,Y,Z)

```

```

66  A(1,I)=A(1,I)/(2.0D0*HH)
    GO TO 30
68  11 A(1,I)=FUN(X,Y+HH,Z)-FUN(X,Y-HH,Z)
    A(1,I)=A(1,I)/(2.0D0*HH)
    GO TO 30
70  12 A(1,I)=FUN(X,Y,Z+HH)-FUN(X,Y,Z-HH)
    A(1,I)=A(1,I)/(2.0D0*HH)
    GO TO 30
72  13 A(1,I)=FUN(X+HH,Y,Z)+FUN(X-HH,Y,Z)-2.0D0*FUN(X,Y,Z)
    A(1,I)=A(1,I)/(HH*HH)
    GO TO 30
74  14 A(1,I)=FUN(X,Y+HH,Z)+FUN(X,Y-HH,Z)-2.0D0*FUN(X,Y,Z)
    A(1,I)=A(1,I)/(HH*HH)
    GO TO 30
76  15 A(1,I)=FUN(X,Y,Z+HH)+FUN(X,Y,Z-HH)-2.0D0*FUN(X,Y,Z)
    A(1,I)=A(1,I)/(HH*HH)
    GO TO 30
78  16 A(1,I)=FUN(X+HH,Y+HH,Z)+FUN(X-HH,Y-HH,Z)
    A(1,I)=A(1,I)-FUN(X-HH,Y+HH,Z)-FUN(X+HH,Y-HH,Z)
    A(1,I)=A(1,I)/(4.0D0*HH*HH)
    GO TO 30
80  17 A(1,I)=FUN(X+HH,Y,Z+HH)+FUN(X-HH,Y,Z-HH)
    A(1,I)=A(1,I)-FUN(X-HH,Y,Z+HH)-FUN(X+HH,Y,Z-HH)
    A(1,I)=A(1,I)/(4.0D0*HH*HH)
    GO TO 30
82  18 A(1,I)=FUN(X,Y+HH,Z+HH)+FUN(X,Y-HH,Z-HH)
    A(1,I)=A(1,I)-FUN(X,Y+HH,Z-HH)-FUN(X,Y-HH,Z+HH)
    A(1,I)=A(1,I)/(4.0D0*HH*HH)
84  30 FAC=CON2
    DO J=2,I
86  A(J,I)=(A(J-1,I)*FAC-A(J-1,I-1))/(FAC-1.0D0)
    FAC=CON2*FAC
88  ERRT=DMAX1(DABS(A(J,I)-A(J-1,I)),DABS(A(J,I)-A(J-1,I-1)))
    IF(ERRT.LE.ERR) THEN
90  ERR=ERRT
92  DERIVATED=A(J,I)
    END IF
94  END DO
96  IF(DABS(A(I,I)-A(I-1,I-1)).GE.SAFE*ERR) RETURN
98  END DO
100 RETURN
102 END

```

```

108 | !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
110 | !cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

deriva.f

B.4. Masas efectivas a lo largo de los ejes

B.4.1. Programa principal

Para el cálculo del tensor de masa efectiva a lo largo de los ejes Δ, Λ y Σ se ha escrito un programa en fortran que tomando como entrada los parámetros del AsGa construye una función que proporciona el valor de energía para cada banda en cualquier punto del espacio \vec{k} y calcula sus derivadas para obtener el tensor de masa efectiva en ese punto, seguidamente lo diagonaliza y escribe el resultado al archivo de salida. Debido a que la función de diagonalización ordena los autovalores de menor a mayor, es necesario guardar, en una matriz auxiliar, la matriz que diagonaliza el tensor de masa efectiva y utilizar ésta en lugar de la que proporciona la función DERIVPAP, ya que si no las componentes del tensor de masa aparecen mezcladas en el archivo de resultados.

```

!Este programa calcula el tensor de masa efectiva para cada una de las bandas del
  hamiltoniano a lo largo de los ejes  $\Delta, \Lambda$  y  $\Sigma$ .
2  PROGRAM progmasasejes
4  ! Declaración de VARIABLES
6  IMPLICIT NONE
8  EXTERNAL:: AUTOVAL1
10 INTEGER :: i , j , k , ip , np
    !Dimensión de la matriz hamiltoniana
12 INTEGER :: ndim
    PARAMETER ( ndim=4)
14
    !Parámetros subrutina de diagonalización (EIGCH)
16 INTEGER :: IW
    PARAMETER ( IW=ndim)
18 INTEGER :: IJOB , IER
    !Índice de la banda

```

```

20  INTEGER :: IB, N1
    PARAMETER (N1=3)
22  !Para ajustar las unidades
    REAL(KIND(0.0D0)) :: UNI, UNI2
24  PARAMETER (UNI2=301.544)

26  REAL(KIND(0.0D0)) :: KX, KY, KZ !Vector de onda
    REAL(KIND(0.0D0)) :: PK, xi, xf, paso
28  REAL(KIND(0.0D0)) :: AVS(ndim) !Valores propios
    REAL(KIND(0.0D0)) :: AUTOVAL1 !Función del autovalor
30

    REAL(KIND(0.0d0)) :: DB(3,3), DM(3,3), DPM(3), DMV(3), DMV2(3),DT
        (3,3)
32  REAL(KIND(0.0d0)) :: DB1(3,3), DMAS(3,3), DPMAS(3), DMASV(3),
        DMASV2(3)
    REAL(KIND(0.0d0)) :: D1(3,3)
34  !Vectores propios
    COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: AUFS(ndim, ndim)
36  !Matriz hamiltoniana
    COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: HKP(ndim, ndim)
38  !Parámetros del AsGa
    REAL(KIND(0.0D0)) :: E0, E1, P0, P1, Q, a, g1, g2, g3
40

    CHARACTER(LEN=2) :: istr
42  CHARACTER(LEN=4) :: file

44  COMMON /PARPAPAS/E0, E1, P0, P1, Q, a, g1, g2, g3
    COMMON /IDBAN/IB
46

! Leo los parámetros de entrada del archivo
48  OPEN(11, FILE='datos.dat') !Abro el fichero de entrada
    READ(11, *) E0 !Energía de los estados  $s_c$ 
50  READ(11, *) E1 !Energía de los estados  $p_c$ 
    READ(11, *) P0 !Parámetro P
52  READ(11, *) P1 !Parámetro P'
    READ(11, *) Q !Parámetro Q
54  READ(11, *) g1 !Parámetros de Luttinger
    READ(11, *) g2
56  READ(11, *) g3
    READ(11, *) a !Constante de red
58  CLOSE(11)

```

```

60  UNI=UNI2/(a**2)

62  IJOB= 12

64  ! CÁLCULO DEL TENSOR DE MASAS EFECTIVA

66  !*****EJE DELTA*****

   DO k=1,ndim !Bucle que recorre las bandas
68     IB= k

       file="ejex"
       write(istr,'(i2.2)') k
70     OPEN(12,FILE=file//istr//".dat",STATUS='UNKNOWN') !Abro el fichero
       de resultados

74     xi=-0.2d0 !x inicial
       xf=0.2d0 !x final

76     KX= 0.0d0
78     KY= 0.0d0
       KZ= 0.0d0

80     paso= (xf-xi)/np

82     ! SUBROUTINA de cálculo de derivadas

84     KX= xi + 1*paso

86     CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)

88     !Se copia la matriz de paso a la matriz diagonal para utilizar siempre ésta y evitar que
       las componentes del tensor de masa efectiva aparezcan mezcladas

90     DO i=1,3
       DO j=1,3
92         DB1(i,j)=DB(i,j)
       END DO
94     END DO

96     ! ESCRITURA DE RESULTADOS

98     KX= 0.0d0
       KY= 0.0d0
100    KZ= 0.0d0

```

```

102  DO ip= 0,np
104      KX= xi + ip*paso
106      PK= KX
108      ! SUBROUTINA de cálculo de derivadas
110      CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)
112      !Se realiza la diagonalización con la matriz guardada anteriormente
114      CALL TRASPUESTAD(DB1,DT)
116      CALL PROD1D(DB,DPM,DPM)
118      CALL PRODD(DT,DM,D1)
120      CALL PRODD(D1,DB1,DM)
122      ! ESCRITURA DE RESULTADOS
124      WRITE(12,10) PK, (UNI*1.d0/DM(j,j),j=1,N1)
126  !*****EJE DIAGONAL (LAMBDA)*****
128  DO k=1,ndim !Bucle que recorre las bandas
130      IB= k
132      file="ejed"
134      write(istr, '(i2.2)') k
136      OPEN(12,FILE=file//istr//".dat",STATUS= 'UNKNOWN') !Abro el fichero
138      de resultados
140      xi=-0.2d0 !x inicial
142      xf=0.2d0 !x final
144      KX= 0.0d0
146      KY= 0.0d0
148      KZ= 0.0d0
150      paso= (xf-xi)/np

```

```
144      ! SUBROUTINA de cálculo de derivadas
146      KX= xi + 1*paso
146      KY=KX
146      KZ=KX
148      CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)
150
150      DO i=1,3 !Copio la matriz de paso para guardarla
152          DO j=1,3
152              DB1(i ,j)=DB(i ,j)
154          END DO
154      END DO
156
156      ! ESCRITURA DE RESULTADOS
158
158      KX= 0.0 d0
160      KY= 0.0 d0
160      KZ= 0.0 d0
162
162      DO ip= 0 ,np
164
164          KX= xi + ip*paso
166          KY=KX
166          KZ=KX
168
168          PK= KX
170
170          ! SUBROUTINA de cálculo de derivadas
172
172          CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)
174
174          CALL TRASPUESTAD(DB1,DT)
176          CALL PROD1D(DB,DPM,DPM)
176          CALL PRODD(DT,DM,D1)
178          CALL PRODD(D1 ,DB1,DM)
180
180          ! ESCRITURA DE RESULTADOS
182          WRITE(12 ,10) PK, ( UNI*1. d0/DM(j ,j) ,j=1,N1)
184
184      END DO
```



```

186     CLOSE(12)
187     END DO
188
189     !***** EJE SIGMA *****
190     DO k=1,ndim !Bucle que recorre las bandas
191         IB= k
192
193         file=" ejes"
194         write(istr , '(i2.2) ') k
195         !Abro el fichero de resultados
196         OPEN(12,FILE=file//istr//".dat",STATUS= 'UNKNOWN')
197
198         xi=-0.2d0 !x inicial
199         xf=0.2d0  !x final
200
201         KX= 0.0d0
202         KY= 0.0d0
203         KZ= 0.0d0
204
205         paso= (xf-xi)/np
206
207         ! SUBROUTINA de cálculo de derivadas
208
209         KX= xi + 1*paso
210         KY=KX
211
212         CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)
213
214         DO i=1,3 !Copio la matriz de paso para guardarla
215             DO j=1,3
216                 DB1(i , j)=DB(i , j)
217             END DO
218         END DO
219
220         ! ESCRITURA DE RESULTADOS
221
222         KX= 0.0d0
223         KY= 0.0d0
224         KZ= 0.0d0
225
226         DO ip= 0,np

```

```

228      KX= xi + ip*paso
      KY=KX
230
      PK= KX
232
      ! SUBROUTINA de cálculo de derivadas
234
      CALL DERIVPAP(KX,KY,KZ,DB,DM,DPM,DMV)
236
      CALL TRASPUESTAD(DB1,DT)
      CALL PROD1D(DB,DPM,DPM)
240      CALL PRODD(DT,DM,D1)
      CALL PRODD(D1,DB1,DM)
242
      ! ESCRITURA DE RESULTADOS
244      WRITE(12,10) PK,(UNI*1.d0/DM(j,j),j=1,N1)
246
      END DO
248      CLOSE(12)
      END DO
250
252 10  FORMAT(1X,160(F12.7,1x))
254
      STOP
256      END PROGRAM progmasasejes
258      !-----!
260      ! FUNCIÓN DE CÁLCULO DE AUTOVALORES
262      FUNCTION AUTOVAL1(KX,KY,KZ)
264
      IMPLICIT NONE
266
      INTEGER :: IB, ndim
      INTEGER :: IJOB, IER, IW
268      PARAMETER(IW=32)

```

```

PARAMETER(ndim=4)
270
REAL(KIND(0.0D0)) :: AUTOVAL1
272
REAL(KIND(0.0D0)) :: WKD(2*IW*IW+4*IW)
274
REAL(KIND(0.0D0)) :: KX,KY,KZ
REAL(KIND(0.0D0)) :: AVS(ndim)
276 !
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: AUFS(ndim ,ndim)
278
COMPLEX(KIND(0.0D0)) :: HKP(ndim ,ndim)

280 REAL(KIND(0.0D0)) :: E0,E1,P0,P1,Q,a,g1,g2,g3 !Parámetros del AsGa

282 COMMON /PARPAPAS/E0,E1,P0,P1,Q,a,g1,g2,g3
COMMON /IDBAN/IB
284

IJOB= 12
286

CALL HAMKP(KX,KY,KZ,HKP,E0,E1,P0,P1,Q,g1,g2,g3,a,ndim)
288 CALL EIGCH(HKP,ndim,IJOB,AVS,AUFS,ndim,WKD,IER)

290 AUTOVAL1= AVS(IB)

292 RETURN
END FUNCTION AUTOVAL1

```

progmasasejes.f

Bibliografía

- [1] PETER Y. YU, MANUEL CARDONA: "Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties", SPRINGER.
- [2] NAG, B. R: "Electron transport in semiconductors", SPRINGER.
- [3] YAN VOON, LOK C. LEW; WILLATZEN: "The k.p method", SPRINGER
- [4] OTFRIED MADELGUNG (ED.): "Semiconductors-Basic Data", SPRINGER
- [5] T. E. OSTROMEK: "Evaluation of matrix elements of the 8x8 k.p Hamiltonian with k-dependent spin-orbit contributions for the zinc-blende structure of GaAs", PHYSICAL REVIEW B, VOLUMEN 54, NÚMERO 20, 15 NOVIEMBRE 1996
- [6] M. CARDONA, N. E. CHRISTENSEN, AND G. FASOL: "Relativistic band structure and spin-orbit splitting of zinc-blende-type semiconductors", PHYSICAL REVIEW B, VOLUMEN 38, NÚMERO 3, 15 JULIO 1988
- [7] CLAUDINE HERMANN AND CLAUDE WEISBUCH: " $\vec{k} \cdot \vec{p}$ perturbation theory in III-V compounds and alloys: a reexamination", PHYSICAL REVIEW B, VOLUMEN 15, NÚMERO 2, 15 ENERO 1977
- [8] MANUEL CARDONA AND FRED H. POLLAK: "Energy-Band structure of Germanium and Silicon: The k.p Method", PHYSICAL REVIEW, VOLUMEN 142, NÚMERO 2, FEBRERO 1966
- [9] P. PFEFFER AND W. ZAWADZKI: "Five-level k.p model for the conduction and valance bands of GaAs and InP", PHYSICAL REVIEW B, VOLUMEN 53, NÚMERO 19, 15 MAYO 1996