



Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Facultad de Ciencias

**Oscilaciones de la red en materiales con
estructura diamante, zinc blenda y wurtzita**

Doctorado en Ciencias

Aspirante: Darío Gustavo Santiago Pérez

Director de Tesis: Rolando Pérez Álvarez

Cuernavaca, Morelos, México, Septiembre 2011

A mi esposa Yanilis,
a mis *niños* Daniela y Diego.

A mis Padres por tantos
desvelos y sacrificios...

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi director de tesis el Dr. Rolando Pérez Álvarez, por aceptarme como su alumno de doctorado y haberme brindado su apoyo incondicional en todos los sentidos.

Al Dr. Fernando de León Pérez, responsable de mi iniciación en este tema de investigación, además de ejemplo y guía durante mis primeros años de investigador.

Al Dr. Carlos Trallero Giner cuya colaboración significó un impulso decisivo para la culminación de este trabajo de tesis.

Al Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos, por su plena disposición a brindar su ayuda en todos los sentidos.

A la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, por haberme acogido en sus instalaciones y haber sido una excelente anfitriona durante todo este tiempo.

A la Universidad de Sancti Spiritus en todos sus niveles administrativos, por haberme brindado su apoyo y facilitar que pudiera llevar a cabo este proyecto de doctorado.

Al Conacyt, por brindar, mediante su programa de becas nacionales los recursos económicos necesarios para este proyecto.

A mis Padres, por su apoyo incondicional durante todos estos años de estudio, a veces a costa de enormes sacrificios. A mis suegros: Noelia y Armando, por haber sido el soporte de mi familia cuando tuve que estar ausente. A mis *niños* Daniela y Diego por ser mi mayor alegría y fuente de motivación. Y finalmente a mi esposa Yanilis, por su amor, su apoyo incondicional y por ser la maravillosa mujer que es.

Publicaciones del autor relacionadas con la tesis

Una parte de los resultados obtenidos en esta tesis han sido publicados en los artículos:

- “Oscilaciones de la red de nitruros cúbicos”, D. G. Santiago-Pérez, Nova Scientia, Vol. 2, 54-63 (2009).
- “Vibrational properties of cubic-III nitrides: Force constants study”, D. G. Santiago-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, Physica **B**, 405, 4776-4779 (2010).

Otros artículos que sirvieron como antecedente a la tesis:

- “Force constants and dispersion relations for the zincblende and diamond structures revisited”, D. G. Santiago-Pérez, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, Revista Mexicana de Física, 52, 163 (2006).
- “Oscilaciones de la red de nitruros cúbicos”. D. G. Santiago-Pérez, F. de León-Pérez, M. E. Mora-Ramos y R. Pérez-Álvarez, Memorias del Primer Taller de Física del Estado Sólido en la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, ISBN: 978-968-878-285-7, (2008).
- “Force constants and dispersion relations in GaN”, D. G. Santiago-Pérez, F. de León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez and Miguel E. Mora-Ramos, PIERS Online, Vol. 4, No. 2, 187-190 (2008).

Resumen

En este trabajo se estudian las oscilaciones de la red en algunos materiales con estructura diamante, zinc blenda y wurtzita, tanto en el volumen como en nanoestructuras. A partir de las ecuaciones clásicas de la dinámica de la red se plantea el problema general de las oscilaciones considerando la interacción hasta un número determinado de vecinos más cercanos. Aprovechando las propiedades de simetría de la red cristalina se obtiene la forma de las matrices de constantes de fuerza de los vecinos considerados y se escriben las ecuaciones en las principales direcciones de alta simetría. En estas direcciones se obtienen modos longitudinales y transversales desacoplados. Las ecuaciones son equivalentes a las ecuaciones de una cadena lineal, estableciéndose una equivalencia entre las constantes de fuerza de la cadena lineal y las constantes de fuerza del problema tridimensional. Las constantes de fuerza se obtienen ajustando las expresiones analíticas de las frecuencias en el centro y borde de la primera zona de Brillouin a valores experimentales. Se reportan los valores numéricos de las constantes de fuerza y las relaciones de dispersión en las principales direcciones de alta simetría. Además de las oscilaciones en el volumen, también se estudian los modos polares ópticos en nanoestructuras, particularmente en nanohilos revestidos (core/shell) con sección transversal cilíndrica, embebidos en un tercer material. Con este objetivo se aplica el modelo fenomenológico completo al estudio de las oscilaciones de estos sistemas. Se determina el acoplamiento de los diferentes modos vibracionales y la dependencia de la frecuencia de los modos con el vector de onda, además de parámetros geométricos como el radio del “core” y el espesor del “shell”. También se determina la influencia sobre los modos vibracionales de los esfuerzos que surgen en estas nanoestructuras.

Abstract

In this work, the lattice dynamics of materials with diamond, zincblende and wurtzite crystalline structure is studied in both bulk and in nanostructure systems. The general problem of the atomic oscillations is formulated starting from the classical equations of motion and including the interactions up to a finite number of nearest neighbors. Making use of lattice symmetry properties the form of the force constant matrix as well as the corresponding equations of motion are obtained along the main high-symmetry directions of the crystal. In these directions, the model produces uncoupled longitudinal and transversal phonon modes. Within the model, the equations of motion are equivalent to the ones of a linear chain equations. A connection is established between the force constants of the linear chain and the corresponding ones of the three-dimensional problem. We obtain the force constants by fitting the analytical expressions for the frequencies at the center and at the border of the first Brillouin zone with experimental results. Dispersion relations for the oscillation modes along the high symmetry directions and numerical values to the force constants are reported. Besides the case of the phonon oscillations in bulk crystals, the thesis also includes the study of polar optical modes in nanostructures, particularly in core/shell nanowires of circular cross section in a host material. For this purpose, a phenomenological continuous model is applied, and the coupling between the different modes is determined. The dependence of mode frequencies on the wave vector and the geometrical parameters as the core radius and shell thickness is reported. The strain effects over the vibrational modes are also determined.

Índice general

Agradecimientos	III
Publicaciones relacionadas con la tesis	V
Resumen	VII
Abstract	IX
Lista de Símbolos	1
Introducción	3
0.1. Problema científico	3
0.2. Objetivos de la tesis	5
0.3. Descripción de la tesis	5
1. Fundamentos teóricos generales	7
1.1. Estructuras cristalinas	7
1.1.1. Estructura diamante	8
1.1.2. Estructura zinc blenda	8
1.1.3. Estructura wurtzita	8
1.2. Grupos de simetría	9
1.2.1. Estructura zinc blenda	12
1.2.2. Estructura diamante	13
1.2.3. Estructura wurtzita	14

1.3. Oscilaciones de la red	15
1.3.1. Aproximación adiabática	15
1.3.2. Potenciales armónicos	15
1.3.3. Ecuaciones dinámicas para los fonones	16
1.3.4. Cadena lineal diatómica.	17
2. Relaciones de dispersión en el modelo de constantes de fuerza para materiales con estructuras diamante y zinc blenda	21
2.1. Oscilaciones de la red en materiales con estructuras diamante y zinc blenda . . .	21
2.1.1. Constantes de fuerza y relaciones de dispersión en materiales con estructura diamante	27
2.1.2. Constantes de fuerza y relaciones de dispersión en materiales con estructura zinc blenda	34
3. Relaciones de dispersión en el modelo de constantes de fuerza para materiales con estructura wurtzita	41
3.1. Oscilaciones de la red en materiales con estructura wurtzita	41
4. Modos polares ópticos en nanohilos revestidos	57
4.1. Introducción	57
4.2. Modelo fenomenológico continuo en simetría cilíndrica	58
4.3. Esfuerzos	65
4.4. Modos polares ópticos en un nanohilo core/shell GaAs-GaP.	67
4.4.1. Modos con $n = 0$ y $k_z = 0$	68
4.4.2. Modos con $n \neq 0$ y $k_z = 0$	72
4.4.3. Modos con $n = 0$ y $k_z \neq 0$	81
Conclusiones	87
Bibliografía	89

Lista de Símbolos

\vec{R}_n	Vector de posición de la celda elemental en la red directa
\vec{a}_i	Vector base de la red directa
$\vec{r}(n, k)$	Vector de posición de los átomos en la red directa
$\vec{\tau}(k)$	Vector de posición de los átomos en la celda elemental
n	Denota la celda elemental
k	Denota los átomos en la celda elemental
\vec{q}_i	Vector base de la red recíproca
Δ, Λ, Σ	Direcciones de alta simetría en la red recíproca
$D_{\alpha\beta}$	Matriz dinámica
$\Phi_{\alpha\beta}$	Matrices de constantes de fuerza
ω	Frecuencia de las oscilaciones
κ_{ij}	Constantes de fuerza de la cadena lineal
\mathbf{Z}^*	Tensor de carga efectiva
ρ_m	Densidad de masa reducida
\vec{u}	Desplazamiento relativo de los iones
φ	Potencial electrostático
$\beta_{T,L}$	Parabolicidades de las ramas ópticas transversal y longitudinal
J_n, N_n, I_n y K_n	Funciones de Bessel, Neumann, Infeld y MacDonald de orden n
k_z	Vector de onda en el modelo fenomenológico completo
ε	Tensor de deformaciones
E	Modulo de Young
ν	Razón de Poisson

Introducción

0.1. Problema científico

En la revolución tecnológica desarrollada durante la segunda mitad del siglo XX y los inicios del siglo XXI, han jugado un papel muy importante la tecnología y ciencia de los materiales. El desarrollo de novedosos métodos de síntesis de nuevos materiales y heteroestructuras, ha redundado en la constante aparición de nuevas aplicaciones. Esto hace que mantenga su vigencia la caracterización de materiales sólidos. La dinámica de la red cristalina influye en un gran número de propiedades de estos. Por esta razón, a pesar de que desde el punto de vista teórico las ecuaciones de movimiento de las oscilaciones de la red son bien conocidas desde hace mucho tiempo [1], es importante su estudio aún en la actualidad. En este sentido han despertado un especial interés en los últimos tiempos los nitruros del grupo III (BN, AlN, GaN e InN), debido sobre todo, a su aplicación en dispositivos electrónicos. Estos nitruros existen con estructura zinc blenda y wurtzita, por tanto es importante el estudio de la dinámica de la red de ambas estructuras. Las técnicas experimentales que se utilizan para estudiar los modos fonónicos en sólidos, son fundamentalmente la dispersión inelástica de neutrones y la dispersión Raman. La dificultad en la preparación de cristales de nitruros del grupo III hace que la dispersión inelástica de neutrones no haya sido aplicada todavía con éxito a estos materiales. Utilizando dispersión Raman de primer orden se han hecho varios reportes de modos fonónicos en el centro y borde de la zona de Brillouin en estructuras zinc blenda y wurtzita de GaN y AlN [2]-[6]. Por su parte utilizando dispersión Raman de segundo orden se pueden determinar los modos a través de toda la zona de Brillouin pero no se han reportado muchos trabajos utilizando esta técnica [7]. Desde el punto de vista teórico se han utilizado una gran variedad de métodos para estudiar estos materiales, como el modelo de Keating [8], el modelo de la carga ligada [9] y cálculos *ab initio* [10]-[13]. Debido a la escasez de reportes y la dificultad que reviste obtener espectros fonónicos de toda la zona de Brillouin, unido a que los cálculos *ab initio* tienen un costo computacional muy alto, no es desacertado emplear métodos más simples para estudiar los modos de vibración de estos materiales. El modelo de la cadena lineal ha sido muy estudiado,

no solo académicamente, sino también en el estudio de heteroestructuras [14]-[18]. A finales de los años 60 se estudiaron las propiedades de materiales con estructura zinc blenda utilizando las ecuaciones clásicas de movimiento [1], en aproximación de interacción hasta segundos vecinos [19]-[21]. En estos trabajos se hace un análisis simplificado del problema, dado sobre todo por la escasez de datos experimentales para realizar el ajuste de las relaciones de dispersión.

El auge que han adquirido, en la última década, los nitruros del grupo III, unido a que ya existen reportes de las frecuencias de oscilación de estos materiales en los puntos de alta simetría, hace atractivo usar este método para el estudio de estos nitruros, tanto con estructura zinc blenda, como con estructura wurtzita.

Unido al estudio de las propiedades dinámicas del sólido, es muy importante el estudio de las heteroestructuras construidas a partir de estos. En los últimos años ha despertado interés el estudio de los nanohilos semiconductores. Con el avance de los métodos de crecimiento de estas estructuras, se ha abierto un amplio rango de aplicaciones en el desarrollo de compuertas lógicas [22], foto sensores [23], diodos emisores de luz [24] y sensores biológicos [25], entre otras. Un caso especial son los nanohilos revestidos en otro material (“core/shell”) ¹. Estos nanohilos “core/shell” han sido estudiados experimentalmente en varias parejas de materiales: GaAs-GaAsP [26], InAs-GaAs [27], GaN-GaP, GaP-GaN [28], GaAs-GaP [29], AlN-GaN [30]. Lo anterior hace que tenga gran importancia la caracterización de estas heteroestructuras y en este sentido uno de los aspectos a considerar es la determinación de los modos fonónicos.

Para el estudio de los modos de oscilación ópticos en los nanohilos revestidos, utilizaremos el modelo fenomenológico completo propuesto originalmente por Trallero, García-Moliner, Velasco y Cardona [31]. Unos pocos años después, y luego de haber sido probado en varios nanosistemas, este modelo fue presentado y analizado en detalle en el libro *Long Wave Polar Modes in Semiconductor Heterostructures* [32].

La primera aplicación del modelo fenomenológico completo fue al pozo cuántico estándar AlAs-GaAs-AlAs [33]. Más tarde se aplicó a pozos de materiales II-VI [34] y superredes de GaAs-AlAs [35]. En hilos cuánticos se podrían mencionar muchos, pero resaltaremos aquí el artículo de Comas, Trallero y Cantarero [36]. En nanotubos de carbono se debe mencionar el trabajo de Chico y Pérez-Álvarez [37]. En lo que respecta a puntos cuánticos el trabajo de Roca, Trallero y Cardona es pionero [38]. Estos éxitos han estado en buena medida propiciados por el tratamiento exacto de las ecuaciones del movimiento y el hallazgo de sendas bases de soluciones linealmente independientes en el caso cuasibidimensional [39], cuasicerodimensional [38], y cuasiunidimensional en varias circunstancias [36, 37].

¹En este trabajo nos referiremos al nanohilo central del sistema que estudiamos como “core” y al recubrimiento del mismo como “shell”.

0.2. Objetivos de la tesis

- Determinar la relación entre las constantes de fuerza del problema tridimensional de las oscilaciones de la red y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente, en las principales direcciones de alta simetría, en las estructuras diamante, zinc blenda y wurtzita.
- Obtener la forma analítica de las matrices dinámicas correspondientes a las estructuras estudiadas.
- Determinar las constantes de fuerza y obtener las expresiones analíticas de las matrices dinámicas correspondientes a las ecuaciones de movimiento de estas estructuras.
- Determinar las constantes de fuerza y las relaciones de dispersión de materiales con estas estructuras, especialmente los nitruros del grupo-III que cristalizan con estructura zinc blenda y wurtzita.
- Aplicar el modelo fenomenológico completo al estudio de las oscilaciones en nanohilos revestidos y determinar los diferentes modos vibracionales de este sistema tanto en el “core” como en el “shell”.
- Obtener como dependen las frecuencias de vibración de los parámetros geométricos de este sistema como son el radio del “core” y el espesor del “shell”.
- Obtener las relaciones de dispersión y determinar la influencia de los esfuerzos sobre los modos vibracionales.

0.3. Descripción de la tesis

La estructura de la tesis es la siguiente. En el capítulo 1, se describen las principales propiedades en cuanto a estructura y simetría de las estructuras cristalinas que se estudiarán. Además se exponen los fundamentos teóricos del método que se usará para estudiar las oscilaciones de la red. En el capítulo 2, se estudia la dinámica de la red de materiales con estructuras diamante y zinc blenda. De materiales con estructura diamante se presentan resultados para el carbono (C), silicio (Si), germanio (Ge) y estaño (α -Sn) y de materiales con estructura zinc blenda para los nitruros de Boro (BN), Aluminio (AlN), Galio (GaN) e Indio (InN). En el capítulo 3, se hace el mismo estudio que en el capítulo 2 pero para materiales con estructura wurtzita, presentándose resultados para los nitruros de Boro, Aluminio, Galio e Indio. El capítulo 4, se dedica al estudio de los modos vibracionales en heteroestructuras utilizando el modelo fenomenológico completo.

Particularmente se estudian nanohilos revestidos en otro material. Por último se hacen las conclusiones de la tesis.

Capítulo 1

Fundamentos teóricos generales

1.1. Estructuras cristalinas

Los sólidos cristalinos se estudian considerándolos como un arreglo periódico de puntos (nodos) en el espacio a los cuales están asociados un cierto número de átomos, que oscilan alrededor de sus posiciones de equilibrio. Se define una base $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ que genera el conjunto de nodos que determinan la red cristalina.

$$\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (1.1)$$

donde n_1, n_2 y n_3 son números enteros. A su vez las posiciones de los átomos asociados a los nodos se caracterizan por un vector $\vec{r}(k)$, donde k numera los átomos. De modo que la posición de un átomo dado tiene la forma

$$\vec{r}(n, k) = \vec{R}_n + \vec{r}(k). \quad (1.2)$$

Al espacio definido por la base $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ se le denomina, espacio directo. La base de la red cristalina en conjunto con la base atómica asociada a los nodos determinan el tipo de estructura cristalina. Además es definido un espacio llamado inverso generado por la base $(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3)$, dada por las relaciones

$$\vec{q}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_k \times \vec{a}_j}{V}, \quad (1.3)$$

donde i, j y k rotan cíclicamente y $V = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$.

1.1.1. Estructura diamante

La red cristalina del diamante es cúbica centrada en las caras [40]. Esta estructura tiene dos átomos de la misma especie asociados a los nodos de la red, cuyas posiciones están dadas por $\vec{r}(\kappa) = (0, 0, 0)$ y $\vec{r}(\kappa') = (-a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ respectivamente, donde κ y κ' denotan a los átomos y a_0 es la constante de la red. La base de la red cúbica centrada en las caras está dada por los vectores $\vec{a}_1 = (a_0/2, 0, 0)$, $\vec{a}_2 = (0, a_0/2, 0)$ y $\vec{a}_3 = (0, 0, a_0/2)$. La figura 1.1 muestra un esquema de la estructura diamante. Se puede apreciar el enlace tetragonal característico de esta estructura, donde cada átomo tiene 4 primeros vecinos, 12 segundos vecinos y 12 terceros vecinos.

1.1.2. Estructura zinc blenda

La zinc blenda es una estructura cúbica centrada en las caras al igual que la estructura diamante pero en este caso la base está constituida por átomos de diferente especie. La figura 1.2 muestra un esquema de esta estructura.

1.1.3. Estructura wurtzita

La estructura wurtzita está constituida por dos estructuras hexagonales compactas [40] desplazadas uc_0 en la dirección axial ($u = \frac{3}{8}$ es un parámetro que caracteriza la distancia interatómica en la red y c_0 es el parámetro de la red). La base de la red está dada por los vectores $\vec{a}_1 = (a_0, 0, 0)$, $\vec{a}_2 = (\frac{1}{2}a_0, \frac{\sqrt{3}}{2}a_0, 0)$ y $\vec{a}_3 = (0, 0, c_0)$. Las posiciones de los átomos asociados a los nodos están dadas por $\vec{r}(\kappa) = (0, 0, 0)$, $\vec{r}(\kappa') = (0, 0, uc_0)$, $\vec{r}(\kappa'') = (\frac{1}{2}a_0, \frac{\sqrt{3}}{6}a_0, \frac{1}{2}c_0)$ y $\vec{r}(\kappa''') = (\frac{1}{2}a_0, \frac{\sqrt{3}}{6}a_0, (u - \frac{1}{2})c_0)$. La figura 1.3 muestra un esquema de la estructura wurtzita.

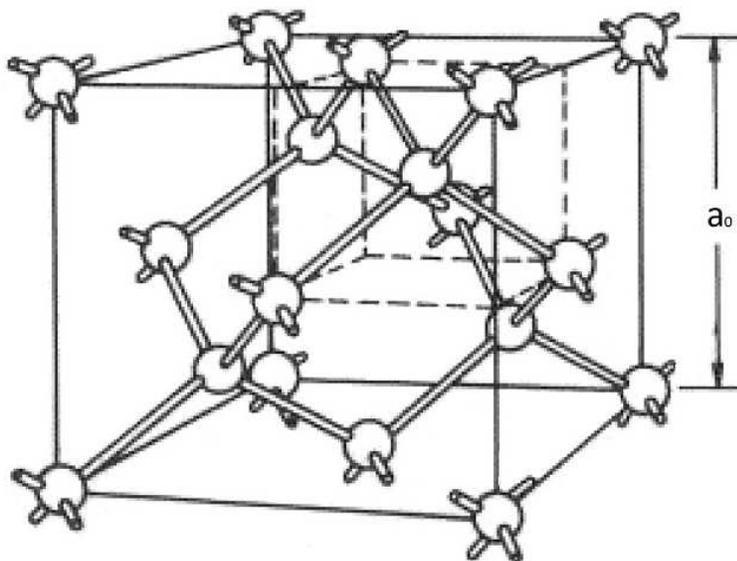


Figura 1.1: Esquema de la estructura diamante.

1.2. Grupos de simetría

La transformación lineal de simetría más general que se puede realizar en el espacio directo se puede representar por la relación

$$\vec{x}' = \{R/t\} \vec{x} = R\vec{x} + \vec{t}, \quad (1.4)$$

donde R representa una rotación y \vec{t} una traslación, en el espacio tridimensional (caso que nos ocupa).

Los grupos espaciales son un caso especial del grupo de las transformaciones lineales de coordenadas del tipo (1.4), donde se conserva la longitud. Ellos se caracterizan por el hecho de que poseen un subgrupo invariante de traslaciones de una forma particular. Todas las traslaciones puras del grupo espacial, comúnmente llamadas traslaciones primitivas, son de la forma

$$\{E/t\}, \quad (1.5)$$

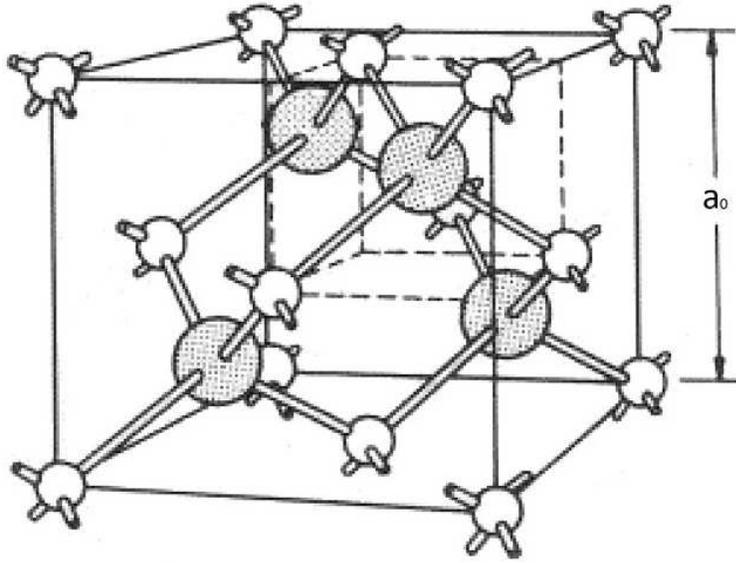


Figura 1.2: Esquema de la estructura zinc blenda.

donde E es la matriz unidad y $\vec{t} = t_1\vec{a}_1 + t_2\vec{a}_2 + t_3\vec{a}_3$ un vector de la red, donde los t_i pertenecen a los enteros. Como consecuencia de esto, las partes rotacionales de los operadores del tipo (1.4) que se pueden llevar a cabo están limitadas. Se encuentra que solamente son posibles rotaciones en un ángulo múltiplo de 60° ó 90° alrededor de un eje bien definido. Así las partes rotacionales en un grupo espacial forman un grupo, el cual puede consistir sólo de rotaciones en un ángulo múltiplo de 60° ó 90° alrededor de un eje bien definido o bien estas rotaciones combinadas con una inversión. En cuanto al número de grupos de este tipo que se pueden formar se determina que en tres dimensiones son 32, los cuales se denominan grupos puntuales [40], los grupos espaciales que tienen una parte rotacional perteneciente a un grupo puntual determinado, se dice que forman una clase. Una vez conocida la clase a la cual pertenece un grupo espacial dado, se puede obtener información acerca del posible subgrupo invariante de traslaciones que este posee. Tenemos que si t_n es una traslación primitiva, entonces Rt_n también lo es siempre que $\{R/t\}$ sea miembro del grupo espacial en cuestión. De este modo la red generada por una traslación primitiva de un grupo espacial debe ser invariante bajo las operaciones del grupo puntual. Investigando en este sentido se demuestra que son 14 los tipos

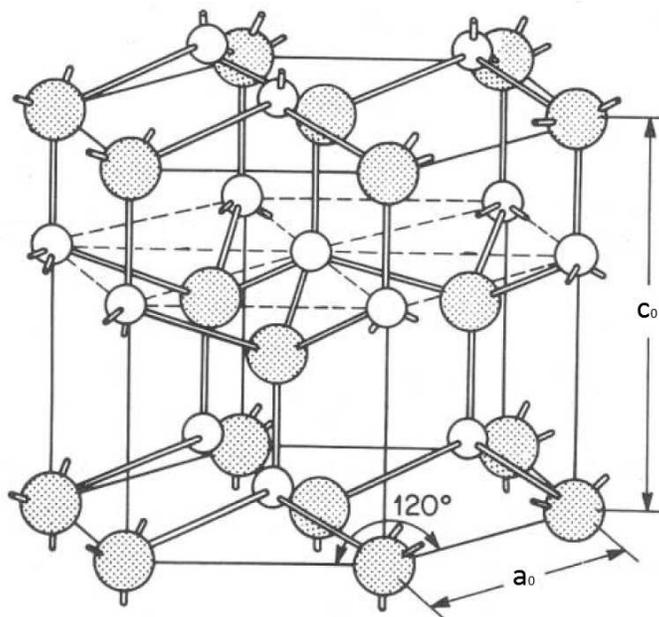


Figura 1.3: Esquema de la estructura wurtzita.

de redes significativas, las cuales se denominan redes de Bravais. Para denotar las operaciones de simetría se usará la notación estándar: $E \rightarrow$ identidad, $C_n \rightarrow$ rotación en un ángulo de $2\pi/n$ (como vimos anteriormente éstas están limitadas a ángulos múltiplos de 60° ó 90°), $I \rightarrow$ inversión a través del origen, $IC_2 \rightarrow$ es una reflexión. Las reflexiones se pueden denotar por σ , σ_h denota una reflexión a través de un plano perpendicular al eje principal de simetría y σ_v denota una reflexión a través de un plano que contenga el eje principal de simetría y $S_n \rightarrow (n = 2, 3, 4 \text{ y } 6)$ denota una rotación en un ángulo de $2\pi/n$ seguida de una reflexión en un plano perpendicular al eje de rotación. Una clasificación completa de los grupos puntuales y las redes de Bravais se puede encontrar en [40]. En este trabajo, para cada estructura estudiada, se determinan las representaciones de los grupos puntuales de las principales direcciones de simetría; tomando como base de la representación los desplazamientos atómicos relativos. A su vez estas representaciones se representan como suma directa de las representaciones irreducibles del grupo. Esto permite determinar el desacoplamiento y degeneración de los modos fonónicos en la dirección dada.

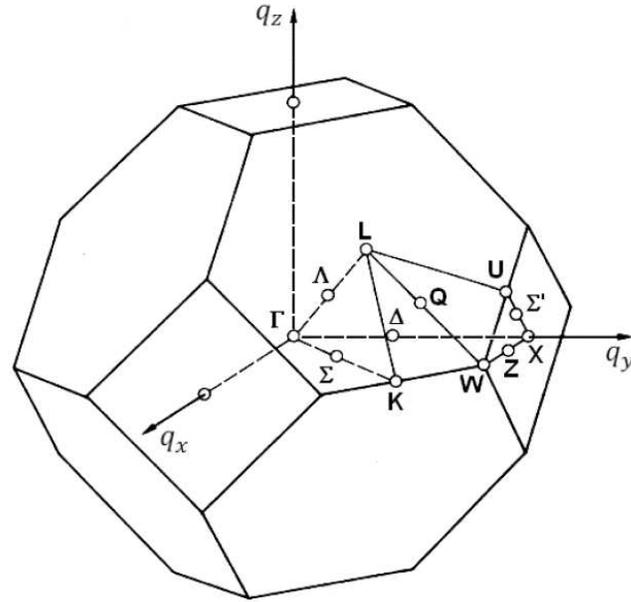


Figura 1.4: Principales direcciones, puntos y planos de simetría de la primera zona de Brillouin en la estructura cúbica centrada en el cuerpo.

1.2.1. Estructura zinc blenda

La estructura zinc blenda está compuesta por dos estructuras cúbicas centradas en las caras de elementos diferentes, desplazadas $\frac{\sqrt{3}}{4}a_0$ (a_0 es la constante de la red), en el sentido de la diagonal del cubo. Este tipo de estructura es cúbica centrada en el cuerpo en el espacio inverso. La figura 1.4 muestra las direcciones, puntos y planos de simetría de la zona de Brillouin de esta estructura. Nosotros nos limitaremos en esta sección a describir las direcciones que usaremos en el trabajo.

En una dirección dada de la zona de Brillouin los desplazamientos atómicos transforman entre sí según una representación del grupo puntual de simetría. Al escribir esta representación como suma de representaciones irreducibles es posible determinar a priori la degeneración de los estados fonónicos, a continuación se describen las principales direcciones de simetría. En lo adelante las representaciones del grupo puntual de simetría se denotan por D_j^u , donde u representa que se están tomando los desplazamientos atómicos relativos (u_α) como base de la representación

y j representa la dirección de simetría en cuestión

Δ . Punto general en la dirección del eje q_y . El grupo puntual de simetría es C_{2v} y la representación está dada por

$$D_{\Delta}^u = 2\Delta_1 \oplus 2\Delta_3 \oplus 2\Delta_4.$$

Σ . Punto general contenido en el plano $q_x = q_y$. El grupo puntual de simetría es C_s .

$$D_{\Sigma}^u = 4\Sigma_1 \oplus 2\Sigma_2.$$

Λ . Punto general en el eje que se extiende desde el centro de la zona de Brillouin hasta el centro de la cara hexagonal. El grupo puntual de simetría es C_{3v} y la representación está dada por

$$D_{\Lambda}^u = 2\Lambda_1 \oplus 2\Lambda_3.$$

1.2.2. Estructura diamante

Al igual que la zinc blenda las estructuras tipo diamante están constituidas por dos estructuras cúbicas centradas en las caras desplazadas $\frac{\sqrt{3}}{4}a_0$ en el sentido de la diagonal del cubo, con la diferencia de que las dos estructuras están constituidas por el mismo elemento. Como en el caso anterior la zona de Brillouin es la mostrada en la figura 1.4. Las principales direcciones de simetría se describen a continuación

Δ . Punto general en la dirección del eje q_y . El grupo puntual de simetría es C_{4v} y la representación está dada por

$$D_{\Delta}^u = \Delta_1 \oplus \Delta'_2 \oplus 2\Delta_5.$$

Σ . Punto general contenido en el plano $q_x = q_y$. El grupo puntual de simetría es C_{2v} .

$$D_{\Sigma}^u = 2\Sigma_1 \oplus \Sigma_2 \oplus 2\Sigma_3 \oplus \Sigma_4.$$

Λ . Punto general en el eje que se extiende desde el centro de la zona de Brillouin hasta el centro de la cara hexagonal. El grupo puntual de simetría es C_{3v} y la representación está dada por

$$D_{\Lambda}^u = 2\Lambda_1 \oplus 2\Lambda_3.$$

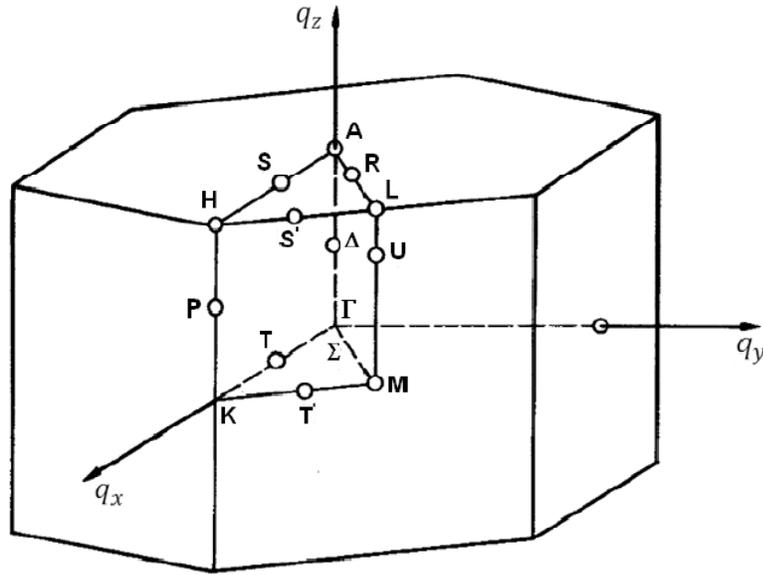


Figura 1.5: Principales direcciones, puntos y planos de simetría de la primera zona de Brillouin en la estructura hexagonal.

1.2.3. Estructura wurtzita

La estructura tipo wurtzita está compuesta por dos estructuras hexagonales compactas de elementos diferentes desplazadas uc_0 en la dirección axial (c_0 es el parámetro de la red en esta dirección y $u = \frac{3}{8}$ en la estructura ideal). La figura 1.5 muestra la zona de Brillouin en los principales puntos, direcciones y planos de simetría de esta estructura. Seguidamente se describen las principales direcciones de simetría.

Δ . Punto general en la dirección del eje q_z . El grupo puntual de simetría es C_{6v} y la representación está dada por

$$D_{\Delta}^u = 2A_1 \oplus 2B_2 \oplus 2E_1 \oplus 2E_2.$$

Σ . Punto general en la dirección del eje desde el origen a la cara rectangular de la zona de Brillouin. El grupo puntual de simetría es C_{2v} y la representación está dada por

$$D_{\Sigma}^u = 4A_1 \oplus 2A_2 \oplus 4B_1 \oplus 2B_2.$$

T . Punto general en la dirección del eje desde el origen a un punto medio de un eje vertical. El grupo puntual de simetría es C_{2v} y la representación está dada por

$$D_T^u = 4A_1 \oplus 2A_2 \oplus 4B_1 \oplus 2B_2.$$

1.3. Oscilaciones de la red

1.3.1. Aproximación adiabática

Resolver las ecuaciones del movimiento de los átomos de un cristal es un problema considerablemente difícil, especialmente por el gran número de partículas que lo componen (electrones e iones). De esta forma las interacciones en un cristal no pueden considerarse como la suma de interacciones por pares de iones. La manera de simplificar este problema es haciendo la llamada aproximación adiabática. Esta se basa en el hecho de que la velocidad típica de los electrones en el cristal es mucho mayor que la velocidad típica de los iones. Se sabe que la velocidad de los electrones es aproximadamente 10^8 cm/s y la de los iones es del orden de 10^5 cm/s, por tanto se asume que los iones se mueven muy lentamente en la escala de velocidades de los electrones. En todo momento estos últimos estarán en su estado básico para cada configuración iónica instantánea. De esta forma se pueden estudiar los dos movimientos por separado [41].

1.3.2. Potenciales armónicos

La otra gran dificultad para resolver este problema es que, una vez que se va a estudiar el movimiento de los iones en un cristal, obtener las ecuaciones del movimiento, considerando la expresión exacta de la energía potencial, es una tarea verdaderamente difícil. Esto se resuelve apoyándose en la consideración de que los átomos no se desvían sustancialmente de sus posiciones de equilibrio, entonces se puede desarrollar en serie de Taylor la energía potencial en función de estos pequeños desplazamientos. En esta aproximación, conocida como aproximación armónica, se obtiene el Hamiltoniano siguiente

$$H = \sum_{n\kappa\alpha} \frac{p_\alpha^2(n\kappa)}{2m_\kappa} + \frac{1}{2} \sum_{n\kappa\alpha, n'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n'\kappa') u_\alpha(n\kappa) u_\beta(n'\kappa'), \quad (1.6)$$

donde $n, n' = 1, 2, \dots, N$ numeran las celdas elementales, $\kappa, \kappa' = 1, 2, \dots, N_A$ numeran los átomos en una celda, $\alpha, \beta = x, y, z$ son los ejes coordenados, m_κ es la masa del κ -ésimo átomo, $p_\alpha(n\kappa)$

es el momento lineal del $n\kappa$ -ésimo átomo en la dirección α , $u_\alpha(n\kappa)$ es el desplazamiento de la posición de equilibrio del $n\kappa$ -ésimo átomo en la dirección α y $\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n'\kappa')$ son las constantes de fuerza.

Estas últimas son simétricas respecto a los índices n , α y κ ,

$$\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n'\kappa') = \Phi_{\beta\alpha}(n'\kappa', n\kappa). \quad (1.7)$$

De la invariancia de la energía potencial ante la traslación infinitesimal del sólido como un todo se deduce la siguiente relación entre ellas

$$\sum_{n\kappa} \Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n'\kappa') = \sum_{n'\kappa'} \Phi_{\beta\alpha}(n'\kappa', n\kappa) = 0. \quad (1.8)$$

Y de la invariancia del sólido rígido ante una traslación en un vector de la red, obtenemos que

$$\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n'\kappa') = \Phi_{\alpha\beta}(n - n'\kappa, 0\kappa'), \quad (1.9)$$

es decir las constantes de fuerza sólo dependen de la posición relativa de las celdas elementales n y n' [41].

1.3.3. Ecuaciones dinámicas para los fonones

Una vez que se ha hecho la aproximación armónica el problema de las oscilaciones de los iones en torno a sus posiciones de equilibrio es matemáticamente equivalente a considerar la red cristalina como si los átomos de la red estuvieran conectados por resortes y su interacción fuera a través de estos, de esta manera se obtienen $3N_A$ ecuaciones del movimiento (una por cada componente de los N_A iones de la celda elemental) del tipo [41]

$$\omega^2 u_\alpha(\kappa) = \sum_{\kappa'\beta} D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) u_\beta(\kappa'), \quad (1.10)$$

donde $D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$ es la matriz dinámica, que tiene la siguiente expresión

$$D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{m_\kappa m_{\kappa'}}} \sum_{n'} \Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n'\kappa') \exp(-i\vec{q} \cdot [\vec{R}(n) - \vec{R}(n')]), \quad (1.11)$$

donde $\vec{R}(n)$ denota el vector de posición de la celda elemental. Esta matriz es hermítica

$$D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = D_{\beta\alpha}^*(\kappa'\kappa, \vec{q}) \quad (1.12)$$

y cumple la propiedad

$$D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', -\vec{q}) = D_{\alpha\beta}^*(\kappa\kappa', \vec{q}). \quad (1.13)$$

Si la matriz de las constantes de fuerza Φ es invariante ante determinada transformación de simetría S , siendo S unitaria, es válida la relación

$$S\Phi S^\dagger = \Phi. \quad (1.14)$$

Utilizando esta última ecuación se pueden establecer ciertas dependencias entre los diferentes elementos matriciales de la matriz de constantes de fuerza.

1.3.4. Cadena lineal diatómica.

En el modelo de cadena lineal se considera un arreglo periódico unidimensional de celdas elementales, cuyo periodo denotaremos por a , donde los átomos están conectados por resortes. En este caso consideraremos una celda con dos átomos, en general de masas diferentes m_1 y m_2 . En la figura 1.6 se muestra un esquema de esta cadena lineal, donde se representan las constantes

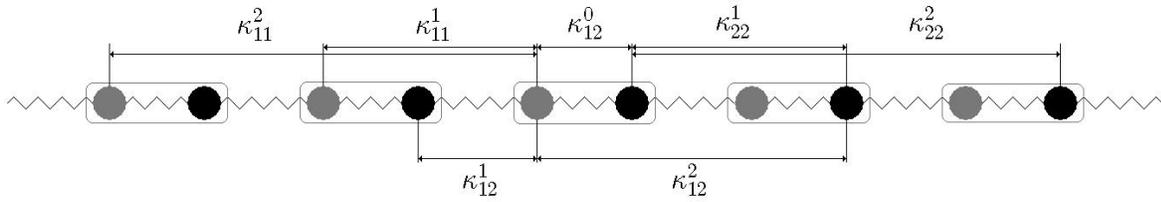


Figura 1.6: Cadena lineal diatómica. En la figura, las κ_{ij}^k denotan las constantes de fuerza entre los diferentes vecinos, donde los índices $i, j = 1, 2$ representan los tipos de átomos y el supraíndice k representa la diferencia de celda elemental entre los átomos interactuantes.

de interacción entre los átomos. Escribiremos las ecuaciones de movimiento considerando la interacción hasta las dos celdas elementales más cercanas. Las soluciones de las ecuaciones de movimiento correspondientes a una cadena lineal de este tipo se pueden proponer como ondas planas ($u_j(n) = u_{j0}e^{i(nqa - \omega t)}$, $j = 1, 2$). De esta forma se tiene que las ecuaciones de movimiento adoptan la forma (1.15)

$$\begin{aligned}
m_1 \frac{d^2 u_1(n)}{dt^2} &= (K + 4\kappa_{11}^1 \text{sen}^2[\frac{qa}{2}] + 4\kappa_{11}^2 \text{sen}^2[qa])u_1(n) \\
&+ (\kappa_{12}^0 + \kappa_{12}^1 e^{iqa} + \kappa_{12}^2 e^{-iqa} + \kappa_{12}^3 e^{2iqa} + \kappa_{12}^4 e^{-2iqa})u_2(n), \\
m_2 \frac{d^2 u_2(n)}{dt^2} &= (\kappa_{12}^0 + \kappa_{12}^1 e^{-iqa} + \kappa_{12}^2 e^{iqa} + \kappa_{12}^3 e^{-2iqa} + \kappa_{12}^4 e^{2iqa})u_1(n) \\
&+ (K + 4\kappa_{22}^1 \text{sen}^2[\frac{qa}{2}] + 4\kappa_{22}^2 \text{sen}^2[qa])u_2(n),
\end{aligned} \tag{1.15}$$

donde $K = \kappa_{12}^0 + \kappa_{12}^1 + \kappa_{12}^2 + \kappa_{12}^3 + \kappa_{12}^4$. Las ecuaciones (1.15) conducen al siguiente problema de autovalores

$$\begin{pmatrix} \omega^2 - D_{11}(q) & D_{12}(q) \\ D_{12}^*(q) & \omega^2 - D_{22}(q) \end{pmatrix} = 0, \tag{1.16}$$

donde

$$\begin{aligned}
D_{11}(q) &= \frac{1}{m_1} \left(K + 4\kappa_{11}^1 \text{sen}^2 \left[\frac{qa}{2} \right] + 4\kappa_{11}^2 \text{sen}^2[qa] \right), \\
D_{22}(q) &= \frac{1}{m_2} \left(K + 4\kappa_{22}^1 \text{sen}^2 \left[\frac{qa}{2} \right] + 4\kappa_{22}^2 \text{sen}^2[qa] \right), \\
D_{12}(q) &= \frac{1}{\sqrt{m_1 m_2}} \left(\kappa_{12}^0 + \kappa_{12}^1 e^{iqa} + \kappa_{12}^2 e^{-iqa} + \kappa_{12}^3 e^{2iqa} + \kappa_{12}^4 e^{-2iqa} \right).
\end{aligned} \tag{1.17}$$

Las soluciones de (1.16) que son denominadas rama acústica y rama óptica, y se denotan por $\omega_{ac}(q)$ y $\omega_{op}(q)$ están dadas por

$$\begin{aligned}
\omega_{ac}(q) &= \sqrt{\frac{D_{11}(q) + D_{22}(q)}{2} - \sqrt{\left(\frac{D_{11}(q) - D_{22}(q)}{2}\right)^2 + |D_{12}(q)|^2}}, \\
\omega_{op}(q) &= \sqrt{\frac{D_{11}(q) + D_{22}(q)}{2} + \sqrt{\left(\frac{D_{11}(q) - D_{22}(q)}{2}\right)^2 + |D_{12}(q)|^2}}.
\end{aligned} \tag{1.18}$$

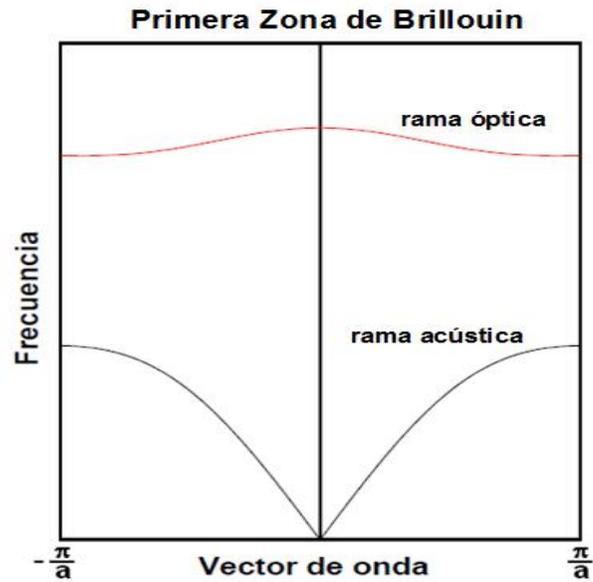


Figura 1.7: Esquema representativo de las ramas acústica y óptica de una cadena lineal diatómica.

En la figura 1.7 se muestra una representación de estas ramas acústica y óptica de una cadena lineal diatómica. En el próximo capítulo obtendremos las ecuaciones de movimiento de las estructuras cristalinas diamante y zinc blenda considerando la interacción hasta terceros vecinos. En esta aproximación se determina en las direcciones de alta simetría el desacoplamiento de las ramas de dispersión y se obtiene la equivalencia con las ramas de la cadena lineal del tipo (1.18).

Capítulo 2

Relaciones de dispersión en el modelo de constantes de fuerza para materiales con estructuras diamante y zinc blenda

2.1. Oscilaciones de la red en materiales con estructuras diamante y zinc blenda

Como habíamos visto en la sección 1.1 tanto el diamante como la zinc blenda son estructuras cúbicas centradas en las caras. En estas estructuras utilizando la aproximación de interacción hasta terceros vecinos escribimos las ecuaciones dinámicas de la red de manera general para una dirección arbitraria y las particularizamos para las direcciones principales de alta simetría. La Tabla 2.1 muestra las posiciones de los primeros, segundos y terceros vecinos, los cuales se denotan por P_i , S_i y T_i respectivamente.

El átomo de referencia y los segundos vecinos son del tipo k , por su parte los primeros y terceros vecinos son del tipo κ' (ver sección 1.1 y tabla 2.1). Esto hace que a la matriz dinámica $D(\kappa\kappa', \vec{q})$ contribuyan solamente los primeros y terceros vecinos. Los primeros vecinos son invariantes ante el grupo puntual C_{3v} [40], que es el grupo del triángulo equilátero; o sea, la rotación C_3 y los planos de inversión que pasan por las bisectrices de los ángulos del triángulo, perpendiculares al mismo, y se interceptan en el eje de orden 3. Por ejemplo, para los operadores de rotación de tercer orden e inversión del átomo situado en $\vec{P}_0 + \vec{\tau}(\kappa')$ se obtienen fácilmente las siguientes representaciones

Vecinos	\vec{R}_n	$ \vec{r}(n, k) $	
Primeros	$P_0 = (0, 0, 0)$	$\frac{\sqrt{3}}{4}a_0$	
	$P_1 = (a_0/2, -a_0/2, 0)$		
	$P_2 = (0, -a_0/2, -a_0/2)$	$P_3 = (a_0/2, 0, -a_0/2)$	
Segundos	$S_0 = (a_0/2, a_0/2, 0)$	$S_1 = (-a_0/2, a_0/2, 0)$	
	$S_2 = (-a_0/2, -a_0/2, 0)$	$S_3 = (a_0/2, -a_0/2, 0)$	
	$S_4 = (0, a_0/2, a_0/2)$	$S_5 = (0, -a_0/2, a_0/2)$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a_0$
	$S_6 = (0, -a_0/2, -a_0/2)$	$S_7 = (0, a_0/2, -a_0/2)$	
	$S_8 = (a_0/2, 0, a_0/2)$	$S_9 = (-a_0/2, 0, a_0/2)$	
	$S_{10} = (-a_0/2, 0, -a_0/2)$	$S_{11} = (a_0/2, 0, -a_0/2)$	
Terceros	$T_0 = (0, a_0/2, -a_0/2)$	$T_1 = (a_0/2, 0, a_0/2)$	
	$T_2 = (a_0/2, a_0/2, 0)$	$T_3 = (0, -a_0/2, a_0/2)$	
	$T_4 = (-a_0/2, 0, -a_0/2)$	$T_5 = (-a_0/2, -a_0/2, 0)$	$\frac{\sqrt{11}}{4}a_0$
	$T_6 = (a_0, -a_0/2, -a_0/2)$	$T_7 = (a_0/2, -a_0, -a_0/2)$	
	$T_8 = (a_0/2, -a_0/2, -a_0)$	$T_9 = (a_0, 0, 0)$	
	$T_{10} = (0, -a_0, 0)$	$T_{11} = (0, 0, -a_0)$	

Tabla 2.1: Posición de los tres primeros vecinos y su distancia al origen, para un sistema cúbico centrado en las caras con dos átomos en la celda elemental.

$$C_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_v = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

La matriz de constantes de fuerza del átomo P_0 se puede escribir de manera general en la forma

$$\Phi_{P_0} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

El hecho de que la matriz de constantes de fuerza Φ_{P_0} sea invariante ante la composición de las transformaciones (2.1) se expresa mediante la condición (1.14)

$$\sigma_v C_3 \Phi_{P_0} C_3^t \sigma_v^t = \Phi_{P_0}. \quad (2.3)$$

De esta forma vemos cuantos elementos de la matriz son independientes y la relación del resto de los elementos con ellos.

Mediante (2.3) se obtienen dos constantes de fuerza independientes. Para obtener las matrices de constantes de fuerza de los tres primeros vecinos (P_i) restantes, se aplican las transformaciones de simetría C_4^z , $\sigma_v^{xy} C_4^z$ y $\sigma_v^{xy} C_4^z$ a Φ_{P_0} y así se obtienen Φ_{P_1} , Φ_{P_2} y Φ_{P_3} respectivamente.

$$\begin{aligned}
\Phi_{P_0} &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{12} & \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ -\alpha_{12} & \alpha_{12} & \alpha_{11} \end{pmatrix}, \\
\Phi_{P_1} &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} & \alpha_{12} \\ -\alpha_{12} & \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ \alpha_{12} & -\alpha_{12} & \alpha_{11} \end{pmatrix}, \\
\Phi_{P_2} &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{12} \\ \alpha_{12} & \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{12} & \alpha_{12} & \alpha_{11} \end{pmatrix}, \\
\Phi_{P_3} &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & -\alpha_{12} \\ \alpha_{12} & \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{12} & -\alpha_{12} & \alpha_{11} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Los terceros vecinos tienen iguales posiciones en la celda elemental que los primeros vecinos, o sea, las posiciones de estos se obtienen a partir de las posiciones de los primeros vecinos, por medio de traslaciones en un vector de la red. Como las matrices de constantes de fuerza son invariantes ante las traslaciones en un vector de la red \vec{R}_n , las matrices de constantes de fuerza de los terceros vecinos tienen la misma forma que las matrices de constantes de fuerza de los primeros vecinos. Las relaciones entre unas y otras se muestra en (2.5).

$$\begin{aligned}
\Phi_{T_9} = \Phi_{T_{10}} &= \Phi_{T_{11}} \Rightarrow \Phi_{P_0}, \\
\Phi_{T_2} = \Phi_{T_5} &= \Phi_{T_8} \Rightarrow \Phi_{P_1}, \\
\Phi_{T_0} = \Phi_{T_3} &= \Phi_{T_6} \Rightarrow \Phi_{P_2}, \\
\Phi_{T_1} = \Phi_{T_4} &= \Phi_{T_7} \Rightarrow \Phi_{P_3}.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Haciendo uso de las relaciones (2.5) y denotando las constantes de fuerza de los terceros vecinos por γ_{ij} se tiene que las matrices de constantes de fuerza de los terceros vecinos están dadas por

$$\begin{aligned}
\Phi_{T_9} &= \Phi_{T_{10}} = \Phi_{T_{11}} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & -\gamma_{12} & -\gamma_{12} \\ -\gamma_{12} & \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ -\gamma_{12} & \gamma_{12} & \gamma_{11} \end{pmatrix}, \\
\Phi_{T_2} &= \Phi_{T_5} = \Phi_{T_8} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & -\gamma_{12} & \gamma_{12} \\ -\gamma_{12} & \gamma_{11} & -\gamma_{12} \\ \gamma_{12} & -\gamma_{12} & \gamma_{11} \end{pmatrix}, \\
\Phi_{T_0} &= \Phi_{T_3} = \Phi_{T_6} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{12} \\ \gamma_{12} & \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{12} & \gamma_{12} & \gamma_{11} \end{pmatrix}, \\
\Phi_{T_1} &= \Phi_{T_4} = \Phi_{T_7} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & -\gamma_{12} \\ \gamma_{12} & \gamma_{11} & -\gamma_{12} \\ -\gamma_{12} & -\gamma_{12} & \gamma_{11} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Teniendo en cuenta las posiciones de las celdas elementales de los átomos, ver tabla 2.1, se tiene que la matriz dinámica $D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$ que determina la interacción con los primeros y terceros vecinos está dada por

$$\begin{aligned}
D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) &= \frac{1}{\sqrt{m_\kappa m_{\kappa'}}} [\Phi_{P_0} + \Phi_{P_1} e^{i(q_x - q_y) \frac{a_0}{2}} + \Phi_{P_2} e^{-i(q_y + q_z) \frac{a_0}{2}} + \Phi_{P_3} e^{i(q_x - q_z) \frac{a_0}{2}} \\
&+ \Phi_{T_0} (e^{i(q_y - q_z) \frac{a_0}{2}} + e^{-i(q_y - q_z) \frac{a_0}{2}} + e^{i(2q_x - q_y - q_z) \frac{a_0}{2}}) \\
&+ \Phi_{T_1} (e^{i(q_x + q_z) \frac{a_0}{2}} + e^{-i(q_x + q_z) \frac{a_0}{2}} + e^{i(q_x - 2q_y - q_z) \frac{a_0}{2}}) \\
&+ \Phi_{T_2} (e^{i(q_x + q_y) \frac{a_0}{2}} + e^{-i(q_x + q_y) \frac{a_0}{2}} + e^{i(q_x - q_y - 2q_z) \frac{a_0}{2}}) \\
&+ \Phi_{T_9} (e^{iq_x a_0} + e^{-iq_y a_0} + e^{-iq_z a_0}).
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Como se ha considerado sólo la interacción hasta terceros vecinos para calcular $D(\kappa\kappa, \vec{q})$ sólo se tiene en cuenta los segundos vecinos. Estos átomos son invariantes ante el grupo puntual C_{2v} , que es el que deja invariante un rectángulo; o sea, las rotaciones C_2 y las reflexiones en

dos planos mutuamente perpendiculares que se interceptan en el eje de rotación [40]. Para S_0 las operaciones de simetría se representarán por las matrices

$$C_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_v = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

La matriz de constantes de fuerza del átomo S_0 se escribe de manera general en la forma

$$\Phi_{S_0} = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Mediante el mismo procedimiento que en el caso anterior se obtienen los parámetros independientes de la matriz de constantes de fuerza y la forma que tienen éstas para los restantes segundos vecinos. A continuación se listan las matrices de constantes de fuerza de los segundos vecinos restantes. Estas se obtienen aplicando a Φ_{S_0} las transformaciones de simetría correspondientes en cada caso.

$$\begin{aligned} \Phi_{S_0} = \Phi_{S_2} &= \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & 0 \\ \beta_{12} & \beta_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix}, & \Phi_{S_1} = \Phi_{S_3} &= \begin{pmatrix} \beta_{11} & -\beta_{12} & 0 \\ -\beta_{12} & \beta_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix} \\ \Phi_{S_4} = \Phi_{S_6} &= \begin{pmatrix} \beta_{33} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{11} & \beta_{12} \\ 0 & \beta_{12} & \beta_{11} \end{pmatrix}, & \Phi_{S_5} = \Phi_{S_7} &= \begin{pmatrix} \beta_{33} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{11} & -\beta_{12} \\ 0 & -\beta_{12} & \beta_{11} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{S_8} = \Phi_{S_{10}} &= \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 & \beta_{12} \\ 0 & \beta_{33} & 0 \\ \beta_{12} & 0 & \beta_{11} \end{pmatrix}, & \Phi_{S_9} = \Phi_{S_{11}} &= \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 & -\beta_{12} \\ 0 & \beta_{33} & 0 \\ -\beta_{12} & 0 & \beta_{11} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Aprovechando la propiedad de simetría (1.8) se obtiene la matriz de constantes de fuerza $\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n\kappa)$.

$$\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n\kappa) = -4(\alpha_{11} + 3\gamma_{11} + 2\beta_{11} + \beta_{33})\hat{I}, \quad (2.11)$$

donde \hat{I} es la matriz unidad de orden tres.

La matriz dinámica de interacción con los segundos vecinos está dada por la expresión

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa, \vec{q}) &= \frac{1}{m_\kappa}(\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa, n\kappa) + 2\Phi_{S_0} \cos \left[\frac{(q_x + q_y)a_0}{2} \right] + 2\Phi_{S_1} \cos \left[\frac{(q_x - q_y)a_0}{2} \right] \\ &+ 2\Phi_{S_4} \cos \left[\frac{(q_y + q_z)a_0}{2} \right] + 2\Phi_{S_5} \cos \left[\frac{(q_y - q_z)a_0}{2} \right] \\ &+ 2\Phi_{S_8} \cos \left[\frac{(q_x + q_z)a_0}{2} \right] + 2\Phi_{S_9} \cos \left[\frac{(q_x - q_z)a_0}{2} \right]). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Teniendo en cuenta que los átomos κ' y κ poseen las mismas propiedades de simetría (la posición de κ' se obtiene haciendo una traslación $\vec{\tau}(\kappa')$ de κ , en la celda elemental) la matriz dinámica de interacción entre átomos κ' tiene la misma forma que la matriz dinámica de interacción entre átomos κ . En el caso de la estructura diamante que tiene dos átomos iguales en la celda elemental $D_{\alpha\beta}(\kappa'\kappa', \vec{q}) = D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa, \vec{q})$. En la estructura zinc blenda que tiene átomos diferentes en la celda elemental, la matriz $D_{\alpha\beta}(\kappa'\kappa', \vec{q})$ tiene la misma forma que la matriz $D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa, \vec{q})$ pero las constantes de fuerza son diferentes, las cuales denotaremos por δ_{ij} . En las secciones siguientes se obtiene la relación entre el problema 3D de las oscilaciones de la red de estas estructuras, en direcciones de alta simetría y las cadenas lineales equivalentes en cada caso.

2.1.1. Constantes de fuerza y relaciones de dispersión en materiales con estructura diamante

Conociendo la matriz dinámica (1.11) dada por (2.7) y (2.12), se pueden escribir las ecuaciones de movimiento del problema tridimensional de las oscilaciones de la red en cualquier dirección de la zona de Brillouin. En las direcciones $\Gamma X \rightarrow [100]$, $\Gamma L \rightarrow [111]$ y $\Gamma KX \rightarrow [110]$ las oscilaciones longitudinales se desacoplan de las transversales y en cada caso se pueden describir

Cadena Lineal	Problema 3D Longitudinal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11})$	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11} - 2\alpha_{12} - 4\gamma_{12})$
κ_{12}^1	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11})$	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11} + 2\alpha_{12} + 4\gamma_{12})$
κ_{12}^2	$-2\gamma_{11}$	$-(2\gamma_{11} + 2\gamma_{12})$
κ_{12}^3	$-2\gamma_{11}$	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12})$
κ_{12}^4	0	0
$\kappa_{11}^1 = \kappa_{22}^1$	$-4\beta_{11} = -4\delta_{11}$	$-(2\beta_{11} + 2\beta_{33}) = -(2\delta_{11} + 2\delta_{33})$
$\kappa_{11}^2 = \kappa_{22}^2$	0	0

Tabla 2.2: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección ΓX en el diamante y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

mediante un modelo de cadena lineal. En las tablas 2.2, 2.3 y 2.4 se muestra la relación entre las constantes de fuerza del problema 3D y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente en cada caso. Las constantes de fuerza del problema 3D y las constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes a los diferentes modos, dadas en las tablas 2.2, 2.3 y 2.4 se obtienen ajustando las relaciones de dispersión en el centro y borde de la zona de Brillouin a datos experimentales. De esta forma al determinar todos los parámetros independientes del problema se obtienen las relaciones de dispersión en cualquier dirección de la zona de Brillouin. La representación de las ecuaciones de movimiento de las oscilaciones de la red en direcciones de alta simetría a partir de las ecuaciones del modelo de cadena lineal, además de simplificar las ecuaciones de trabajo, permite conocer la contribución de las diferentes esferas de coordinación (grupos de vecinos) a las relaciones de dispersión. En las tablas 2.6 y 2.7 se muestran las constantes de fuerza del problema 3D y de las constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes obtenidas por este método para C, Si, Ge y α -Sn, los datos para el ajuste fueron tomados de [42], [43], [44] y [45] respectivamente. En las figuras 2.1, 2.2, 2.3 y 2.4 se muestran las relaciones de dispersión obtenidas para estos materiales. Estas relaciones de dispersión no muestran muy buena concordancia con los datos experimentales que se comparan, aunque describen cualitativamente el comportamiento de las ramas. En trabajos anteriores [46] se mostró que para obtener una buena concordancia de las relaciones de dispersión con datos experimentales se necesita considerar la interacción hasta quintos vecinos. Sin embargo para hacer el ajuste considerando la interacción hasta terceros vecinos, solamente se necesita conocer las frecuencias en el centro y borde de la primera zona de Brillouin.

Cadena Lineal	Problema 3D Longitudinal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-(\alpha_{11} + 6\gamma_{11} + 2\alpha_{12} - 4\gamma_{12})$	$-(\alpha_{11} + 6\gamma_{11} - \alpha_{12} + 2\gamma_{12})$
κ_{12}^1	$-(3\alpha_{11} + 3\gamma_{11} - 2\alpha_{12} - 2\gamma_{12})$	$-(3\alpha_{11} + 3\gamma_{11} + \alpha_{12} + \gamma_{12})$
κ_{12}^2	$-(3\gamma_{11} + 6\gamma_{12})$	$-(3\gamma_{11} - 3\gamma_{12})$
κ_{12}^3	0	0
κ_{12}^4	0	0
$\kappa_{11}^1 = \kappa_{22}^1$	$-(2\beta_{11} + 2\beta_{12} + \beta_{33})$ $= -(2\delta_{11} + 2\delta_{12} + \delta_{33})$	$-(2\beta_{11} - \beta_{12} + \beta_{33})$ $= -(2\delta_{11} - \delta_{12} + \delta_{33})$
$\kappa_{11}^2 = \kappa_{22}^2$	0	0

Tabla 2.3: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección ΓL en el diamante y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

Cadena Lineal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-(2\alpha_{11} + 2\gamma_{11} + 2\alpha_{12} + 2\gamma_{12})$
κ_{12}^1	$-(\alpha_{11} + 3\gamma_{11} - \alpha_{12} + \gamma_{12})$
κ_{12}^2	$-(\alpha_{11} + 3\gamma_{11} - \alpha_{12} + \gamma_{12})$
κ_{12}^3	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12})$
κ_{12}^4	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12})$
$\kappa_{11}^1 = \kappa_{22}^1$	$-(2\beta_{11} + 2\beta_{33}) = -(2\delta_{11} + 2\delta_{33})$
$\kappa_{11}^2 = \kappa_{22}^2$	$-(\beta_{11} - \beta_{12}) = -(\delta_{11} - \delta_{12})$

Tabla 2.4: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección ΓKX en el diamante y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

Tabla 2.5: Frecuencias en los puntos de alta simetría Γ , X y L de C, Si, Ge y α -Sn con estructura tipo diamante. Todos los datos están dados en THz. Ref. [45].

ω (THz)	$\Gamma_{LO/TO}$	X_{TA}	$X_{LA/LO}$	X_{TO}	L_{TA}	L_{LA}	L_{LO}	L_{TO}
C								
	39.7	24.0	36.8	32.8	16.8	32.4	38.2	36.9
	39.9	23.6	36.7	33.1	16.5	32.4	37.9	37.1
	38.6	23.4	35.7	31.6	16.4	31.1	37.3	35.7
	38.9	23.2	35.8	32.1	16.2	31.5	37.2	36.1
	39.0	23.4	35.9	32.1	16.4	32.5	37.4	36.1
	40.4	24.0	36.8	32.9	16.7	32.1	38.4	37.3
	41.0	24.1	37.3	33.6	16.8	32.7	38.7	37.9
	40.3	24.2	36.1	32.6	16.4	31.0	37.2	36.3
Si								
	15.5	4.4	12.4	14.0	3.3	11.3	12.6	14.8
	15.2	4.2	12.1	13.6	3.2	11.1	12.1	14.4
	15.3	4.0	12.2	13.7	3.1	11.1	12.3	14.6
	15.4	4.2	12.3	13.8	3.2	11.2	12.4	14.6
	15.9	4.7	12.6	14.1	3.5	11.6	12.7	15.1
	15.8	4.7	12.6	14.0	3.5	1.6	12.5	15.0
	15.5	4.5	12.3	13.9	3.4	11.4	12.6	14.7
Ge								
	9.17	2.40	7.28	8.24	1.86	6.72	7.34	8.72
	8.71	2.33	6.97	7.85	1.90	6.50	6.97	8.31
	8.78	2.20	7.02	7.97	1.81	6.48	7.09	8.40
	8.91	2.14	7.12	8.14	1.79	6.51	7.27	8.55
	9.16	2.40	7.29	8.26	1.85	6.74	7.37	8.74
	9.01	2.43	7.16	8.07	1.85	6.68	7.17	8.57
	9.11	2.40	7.22	8.27	1.89	6.66	7.34	8.69
α -Sn								
	5.9	1.2	4.7	5.5	1.1	4.2	4.9	5.7
	5.83	1.05	4.83	5.86	1.01	4.16	5.19	5.99
	5.45	1.23	4.56	5.45	1.10	4.01	4.78	5.62
	5.51	1.08	4.60	5.55	1.02	4.01	4.88	5.70
	5.70	0.94	4.68	5.68	0.95	4.04	5.03	5.82
	6.10	1.10	4.75	5.73	0.86	4.19	5.06	5.92
	5.86	1.21	4.56	5.42	0.92	4.11	4.77	5.65
	6.0	1.3	4.7	5.5	1.0	4.2	4.9	5.7

Constantes de Fuerza	α_{11}	α_{12}	$\beta_{11}=\delta_{11}$	$\beta_{12}=\delta_{12}$	$\beta_{33}=\delta_{33}$	γ_{11}	γ_{12}
C	-4.11	-0.99	-0.58	-0.60	0.55	-0.05	-0.04
Si	-1.55	-0.84	-0.09	-0.08	0.17	-0.05	-0.06
Ge	-1.36	-0.77	-0.08	-0.08	0.14	-0.04	-0.05
α -Sn	-1.02	-0.56	-0.05	-0.06	0.10	0.04	0.05

Tabla 2.6: Constantes de fuerza del problema 3D para cristales de Carbono, Silicio, Germanio y Estaño con estructura tipo diamante. Las unidades están dadas en 10^5 dyn/cm.

Constantes de Fuerza	κ_{12}^0	κ_{12}^1	κ_{12}^2	κ_{12}^3	κ_{12}^4	$\kappa_{11}^1 = \kappa_{22}^1$	$\kappa_{11}^2 = \kappa_{22}^2$	
C	L[100]	8.03	8.03	-0.09	-0.09	0	2.32	0
	T[100]	10.17	5.89	-0.17	-0.01	0	0.05	0
	L[111]	10.44	5.65	0	-0.22	0	1.80	0
	T[111]	13.05	2.92	0	-0.10	0	0.01	0
	T[110]	10.18	2.86	2.86	-0.01	-0.01	0.06	-0.02
Si	L[100]	2.90	2.90	-0.10	-0.10	0	0.36	0
	T[100]	4.81	1.00	-0.21	0.01	0	-0.15	0
	L[111]	3.16	2.71	0	-0.27	0	0.18	0
	T[111]	5.18	0.52	0	-0.10	0	-0.07	0
	T[110]	4.80	0.39	0.39	0.01	0.01	-0.16	0.01
Ge	L[100]	2.54	2.54	-0.08	-0.08	0	0.31	0
	T[100]	4.28	0.80	-0.19	0.01	0	-0.13	0
	L[111]	2.72	2.42	0	-0.23	0	0.17	0
	T[111]	4.55	0.43	0	-0.08	0	-0.07	0
	T[110]	4.26	0.31	0.31	0.02	0.02	-0.13	0.00
α -Sn	L[100]	1.86	1.86	-0.084	-0.084	0	0.20	0
	T[100]	3.18	0.55	-0.18	0.01	0	-0.10	0
	L[111]	2.10	1.69	0	-0.22	0	0.13	0
	T[111]	3.34	0.30	0	-0.08	0	-0.06	0
	T[110]	3.17	0.18	0.18	0.01	0.01	-0.10	-0.01

Tabla 2.7: Constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes a los diferentes modos del problema 3D para cristales de Carbono, Silicio, Germanio y Estaño con estructura tipo diamante. Las unidades están dadas en 10^5 dyn/cm.

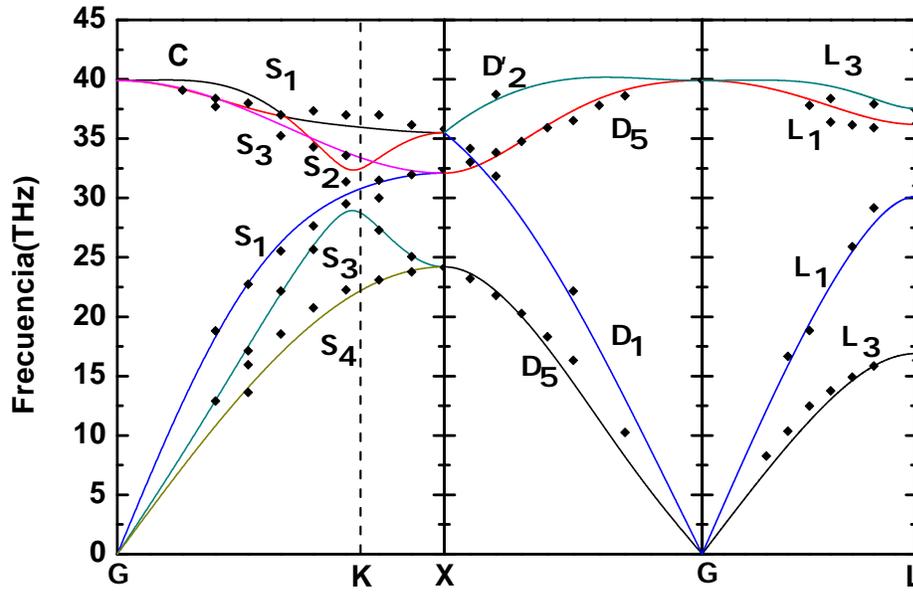


Figura 2.1: Relaciones de dispersión fonónicas del C con estructura. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de experimentos de espectroscopia Raman [42].

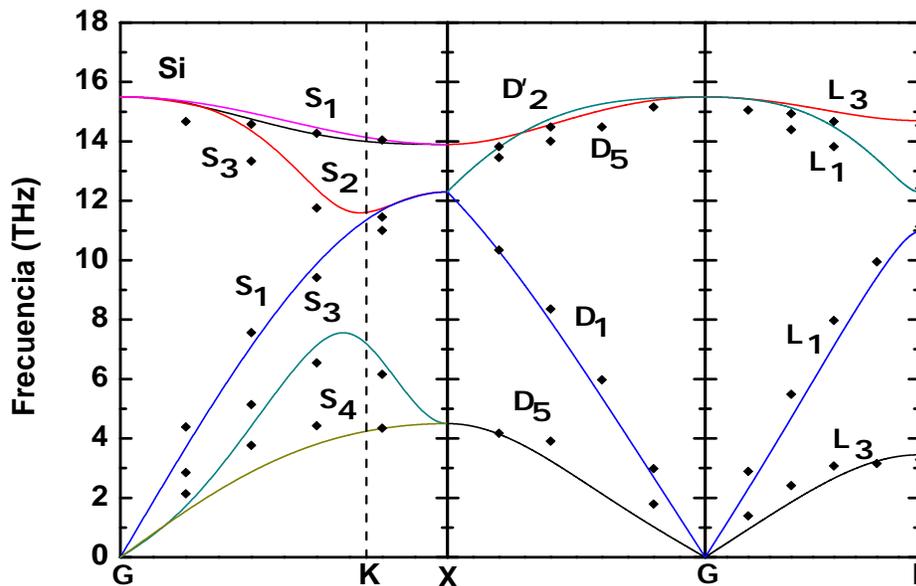


Figura 2.2: Relaciones de dispersión fonónicas del Si con estructura diamante. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de un experimento de dispersión inelástica de neutrones [43].

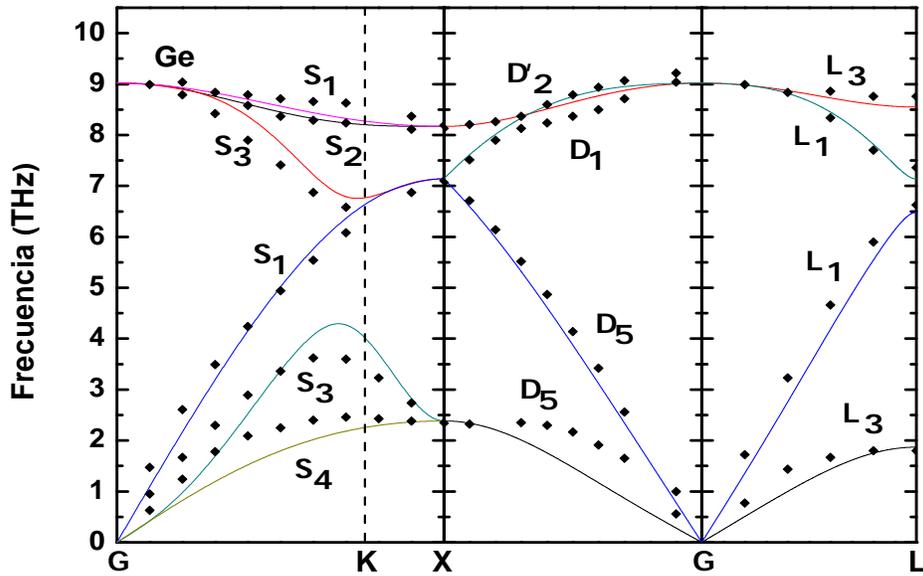


Figura 2.3: Relaciones de dispersión fonónicas del Ge con estructura diamante. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de [47].

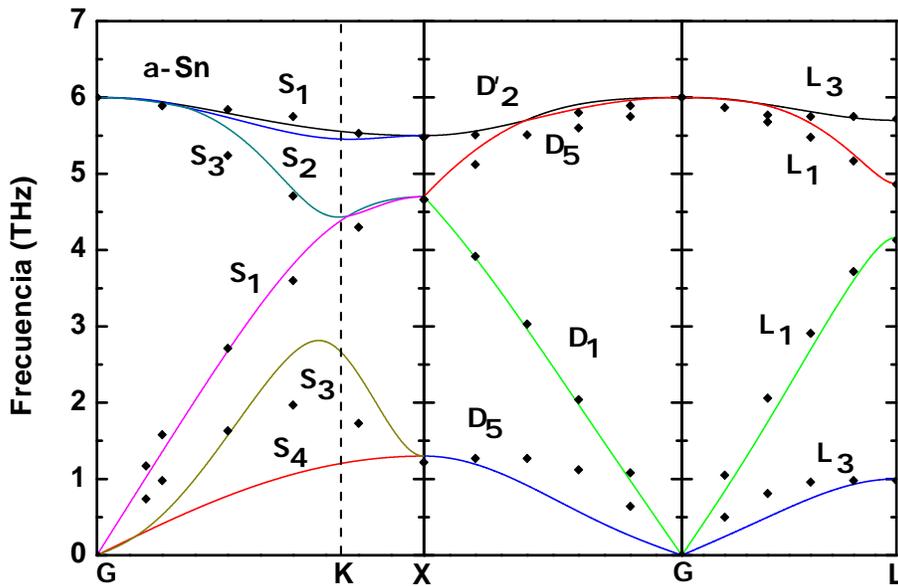


Figura 2.4: Relaciones de dispersión fonónicas del α -Sn con estructura diamante. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de [48].

2.1.2. Constantes de fuerza y relaciones de dispersión en materiales con estructura zinc blenda

En la estructura zinc blenda los dos átomos de la celda elemental son de diferente especie y el enlace es parcialmente iónico. Esto hace que sea necesario considerar en las ecuaciones de movimiento la interacción de largo alcance para describir el rompimiento de la degeneración entre el modo longitudinal óptico y los modos transversales ópticos, en el centro de la zona de Brillouin. Una forma de considerar la interacción de largo alcance es añadiendo a la matriz dinámica (1.11) la expresión (2.13), Ref. [49]. Esta última se obtiene considerando el efecto de la polarización de la red cristalina; describe correctamente el desdoblamiento entre la frecuencia LO y TO en el centro de la zona de Brillouin y no contribuye en la frontera de la primera zona de Brillouin.

$$\frac{4\pi e^2}{V\sqrt{m_\kappa m_{\kappa'}}} \left\{ \frac{[\vec{q} \cdot \mathbf{Z}^*(\kappa)]_\alpha [\vec{q} \cdot \mathbf{Z}^*(\kappa')]_\beta}{|\vec{q}|^2} \right\} \times \exp\{-2\pi i \vec{g} \cdot [\vec{r}(\kappa) - \vec{r}(\kappa')]\} \times \frac{(1 + \cos(\pi|\vec{q}|/|\vec{q}_{BZ}|))}{2} \quad (2.13)$$

donde: e es la carga elemental, \mathbf{Z}^* el tensor de carga efectiva, \vec{q} es el vector de onda centrado de un vector de la red recíproca \vec{g} , V es el volumen de la celda elemental, $(m_\kappa, m_{\kappa'})$ y $(\vec{r}(\kappa), \vec{r}(\kappa'))$ la masa y posición de los átomos, y el vector de onda \vec{q}_{BZ} paralelo a \vec{q} , tiene una magnitud igual a la distancia del centro a la frontera de la zona de Brillouin en esa dirección. En las tablas 2.8, 2.9 y 2.10 se muestra la relación entre las constantes de fuerza del problema 3D y las constantes de fuerza del modelo de cadena lineal en la estructura zinc blenda, el término $\Omega = \frac{4\pi e^2}{V\sqrt{m_\kappa m_{\kappa'}}} Z^2$ resume la contribución de (2.13).

De igual forma que se hizo en la sección anterior para la estructura tipo diamante, las constantes de fuerza del problema 3D y las constantes de fuerza de la cadena lineal se obtienen ajustando las relaciones de dispersión en las direcciones de alta simetría en el centro y borde de la zona de Brillouin. La Tabla 2.11 muestra frecuencias experimentales y resultados de cálculos *ab initio* en los principales puntos de alta simetría para Nitruro de Boro (BN), Nitruro de Aluminio (AlN), Nitruro de Galio (GaN) y Nitruro de Indio (InN) con estructura zinc blenda. En las tablas 2.12 y 2.13 se muestran respectivamente los resultados de las constantes de fuerza del problema tridimensional y de las constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes.

Las figuras 2.5, 2.6, 2.7 y 2.8 muestran las relaciones de dispersión en las direcciones ΓX , ΓL y $\Gamma K X$ de los nitruros de Boro, Aluminio, Galio e Indio con estructura zinc blenda. Las frecuencias necesarias como datos de entrada, se tomaron de cálculos de primeros principios[50] en todos los casos. En las figuras las relaciones de dispersión de este trabajo se comparan con cálculos *ab initio*, los cuales se representan por diamantes negros. Se observa que en general

Cadena Lineal	Problema 3D Longitudinal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11} + \frac{\Omega}{2})$	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11} - 2\alpha_{12} - 4\gamma_{12})$
κ_{12}^1	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11} + \frac{\Omega}{4})$	$-(2\alpha_{11} + 4\gamma_{11} + 2\alpha_{12} + 4\gamma_{12})$
κ_{12}^2	$-(2\gamma_{11} + \frac{\Omega}{4})$	$-(2\gamma_{11} + 2\gamma_{12})$
κ_{12}^3	$-2\gamma_{11}$	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12})$
κ_{12}^4	0	0
κ_{11}^1	$-(4\beta_{11} - \frac{\Omega}{4})$	$-(2\beta_{11} + 2\beta_{33})$
κ_{22}^1	$-(4\delta_{11} - \frac{\Omega}{4})$	$-(2\delta_{11} + 2\delta_{33})$
κ_{11}^2	0	0
κ_{22}^2	0	0

Tabla 2.8: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección ΓX en la zinc blenda y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

Cadena Lineal	Problema 3D Longitudinal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-(\alpha_{11} + 6\gamma_{11} + 2\alpha_{12} - 4\gamma_{12} + \frac{\Omega}{2})$	$-(\alpha_{11} + 6\gamma_{11} - \alpha_{12} + 2\gamma_{12})$
κ_{12}^1	$-(3\alpha_{11} + 3\gamma_{11} - 2\alpha_{12} - 2\gamma_{12} + \frac{\Omega}{4})$	$-(3\alpha_{11} + 3\gamma_{11} + \alpha_{12} + \gamma_{12})$
κ_{12}^2	$-(3\gamma_{11} + 6\gamma_{12} + \frac{\Omega}{4})$	$-(3\gamma_{11} - 3\gamma_{12})$
κ_{12}^3	0	0
κ_{12}^4	0	0
κ_{11}^1	$-(2\beta_{11} + 2\beta_{12} + \beta_{33} - \frac{\Omega}{4})$	$-(2\beta_{11} - \beta_{12} + \beta_{33})$
κ_{22}^1	$= -(2\delta_{11} + 2\delta_{12} + \delta_{33} - \frac{\Omega}{4})$	$= -(2\delta_{11} - \delta_{12} + \delta_{33})$
κ_{11}^2	0	0
κ_{22}^2	0	0

Tabla 2.9: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección ΓL en la zinc blenda y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

Cadena Lineal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-(2\alpha_{11} + 2\gamma_{11} + 2\alpha_{12} + 2\gamma_{12})$
κ_{12}^1	$-(\alpha_{11} + 3\gamma_{11} - \alpha_{12} - 3\gamma_{12})$
κ_{12}^2	$-(\alpha_{11} + 3\gamma_{11} - \alpha_{12} - 3\gamma_{12})$
κ_{12}^3	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12})$
κ_{12}^4	$-(2\gamma_{11} - 2\gamma_{12})$
κ_{11}^1	$-(2\beta_{11} + 2\beta_{33})$
κ_{22}^1	$-(2\delta_{11} + 2\delta_{33})$
κ_{11}^2	$-(\beta_{11} - \beta_{12})$
κ_{22}^2	$-(\delta_{11} - \delta_{12})$

Tabla 2.10: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección $\Gamma K X$ en la zinc blenda y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

las ramas calculadas muestran buena concordancia con los cálculos *ab initio* mencionados. Este resultado es significativo teniendo en cuenta que a pesar de que se consideró sólo interacción hasta segundos vecinos, las ramas de dispersión muestran mejor concordancia que las ramas determinadas en la sección anterior para materiales con estructura tipo diamante. Esto puede estar dado por el hecho de que el modelo de constantes de fuerza funciona mejor cuando el enlace es parcialmente iónico que cuando es covalente. Se puede observar que esta concordancia es especialmente buena para los modos desacoplados, tanto en las direcciones ΓX y ΓL , como $\Gamma K X$. En nuestra consideración esto está dado por el hecho de que en la aproximación de interacción hasta segundos vecinos considerada, se logra describir con más éxito el comportamiento de estas ramas más simples que dependen de menos constantes de fuerza. Otro factor a tener en cuenta es la discrepancia que aún existe en los reportes de las frecuencias que se usan como datos de entrada, ver tabla 2.11.

Tabla 2.11: Frecuencias en los puntos de alta simetría Γ , X y L de BN, AlN, GaN y InN en la estructura zinc blenda. Todos los datos están dados en cm^{-1} .

$\omega(\text{cm}^{-1})$	Γ_{LO}	Γ_{TO}	X_{TA}	X_{LA}	X_{LO}	X_{TO}	L_{TA}	L_{LA}	L_{LO}	L_{TO}
BN										
a	1280	1061	706	1018	1154	939	487	982	1149	1009
b	1308	1066	713	1031	1167	929	503	991	1150	1008
c	1308	1052	682	1028	1110	913	441	981	1197	981
$\Delta\omega$	28	14	31	13	47	26	62	10	48	28
AlN										
a	890	665	341	588	716	668	226	585	735	655
d	903	656	308	608	742	646	219	577	769	639
c	907	662	340	590	734	674	230	582	750	656
$\Delta\omega$	17	6	33	20	26	28	11	8	34	17
GaN										
a	746	567	197	351	695	623	138	349	708	587
e	737	552	189	346	704	621	134	340	717	591
c	750	560	195	353	709	628	139	345	720	585
$\Delta\omega$	13	15	8	7	14	7	5	9	12	6
InN										
a	596	467	116	231	567	518	78	227	573	488
f	585	468	116	195	556	495	82	197	579	478
$\Delta\omega$	6	1	0	36	11	23	4	30	6	10

a) Ref.[50]: Primeros principios b) Ref.[51], d) Ref.[12], e) Ref.[13]: *ab initio*, c) Ref.[9]: Modelo adiabático de la carga ligada, f) Ref.[53]: Dispersión Raman.

Constantes de Fuerza	α_{11}	α_{12}	β_{11}	β_{12}	β_{33}	δ_{11}	δ_{12}	δ_{33}	Ω
BN	-2.57	-0.85	-0.71	-1.28	0.06	-0.70	-0.26	0.70	-4.68
AlN	-1.52	-1.20	-0.29	-0.42	0.29	-0.49	-0.46	-0.11	-4.82
GaN	-1.40	-1.76	-0.28	-0.35	0.19	-0.45	-0.40	-0.48	-4.10
InN	-1.01	-1.55	-0.17	-0.19	0.11	-0.31	-0.37	-0.60	-2.56

Tabla 2.12: Constantes de fuerza del problema 3D para cristales de BN, AlN, GaN y InN con estructura tipo zinc blenda. Las unidades están dadas en 10^5 dyn/cm.

Constantes de Fuerza	κ_{12}^0	κ_{12}^1	κ_{12}^2	κ_{12}^3	κ_{12}^4	κ_{11}^1	κ_{22}^1	κ_{11}^2	κ_{22}^2	
BN	L[100]	7.47	6.30	1.17	0	0	1.69	1.64	0	0
	T[100]	6.84	3.43	0	0	0	1.31	0.02	0	0
	L[111]	8.34	5.44	1.17	0	0	2.76	0.06	0	0
	T[111]	8.55	1.72	0	0	0	0.09	0.45	0	0
	T[110]	6.84	1.72	1.72	0	0	1.31	0.02	-0.57	0.44
AlN	L[100]	5.46	4.25	1.21	0	0	-0.04	0.75	0	0
	T[100]	5.44	0.65	0	0	0	0.00	1.20	0	0
	L[111]	4.59	5.12	1.21	0	0	-0.07	0.80	0	0
	T[111]	5.77	0.33	0	0	0	-0.13	0.64	0	0
	T[110]	5.44	0.33	0.33	0	0	0.00	1.20	-0.13	0.03
GaN	L[100]	4.85	3.83	1.02	0	0	0.10	0.78	0	0
	T[100]	6.33	-0.72	0	0	0	0.18	1.87	0	0
	L[111]	2.73	5.95	1.02	0	0	0.04	1.17	0	0
	T[111]	5.97	-0.36	0	0	0	0.02	0.99	0	0
	T[110]	6.33	-0.36	-0.36	0	0	0.17	1.87	-0.07	-0.05
InN	L[100]	3.32	2.68	0.64	0	0	0.03	0.63	0	0
	T[100]	5.14	-1.06	0	0	0	0.11	1.83	0	0
	L[111]	1.23	4.76	0.64	0	0	-0.04	1.34	0	0
	T[111]	4.60	-0.53	0	0	0	0.03	0.86	0	0
	T[110]	5.13	-0.53	-0.53	0	0	0.11	1.83	-0.02	-0.05

Tabla 2.13: Constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes a los diferentes modos del problema 3D para cristales de BN, AlN, GaN y InN con estructura tipo zinc blenda. Las unidades están dadas en 10^5 dyn/cm.

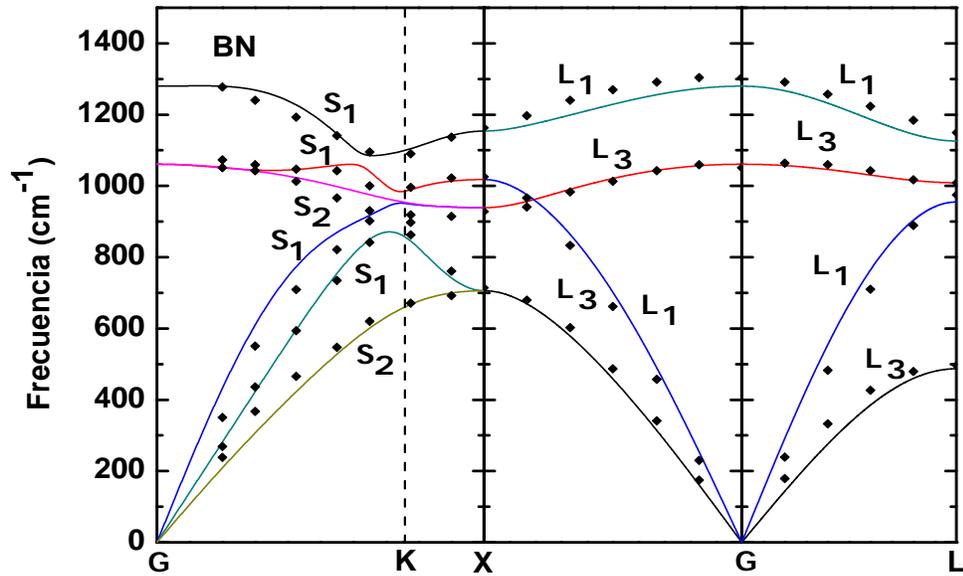


Figura 2.5: Relaciones de dispersión fonónicas para el BN con estructura zinc blenda. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de cálculos *ab initio* [51].

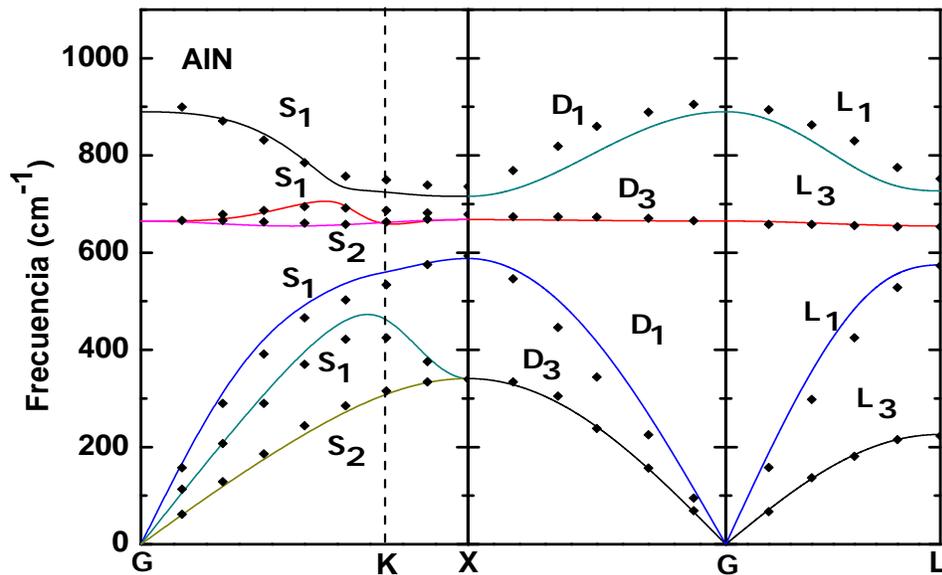


Figura 2.6: Relaciones de dispersión fonónicas para el AlN con estructura zinc blenda. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de cálculos *ab initio* [12] y [13].

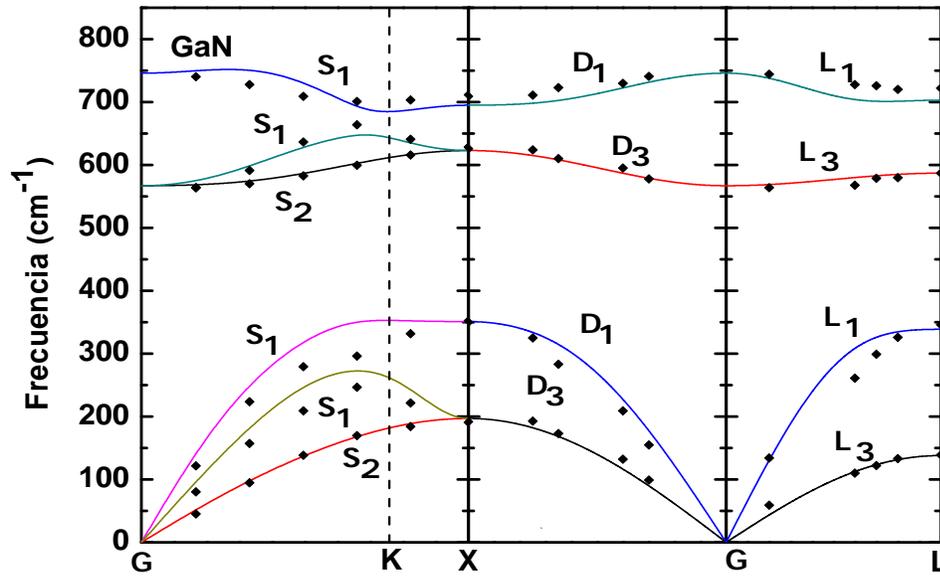


Figura 2.7: Relaciones de dispersión fonónicas para el GaN con estructura zinc blenda. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de cálculos *ab initio* [12] y [13].

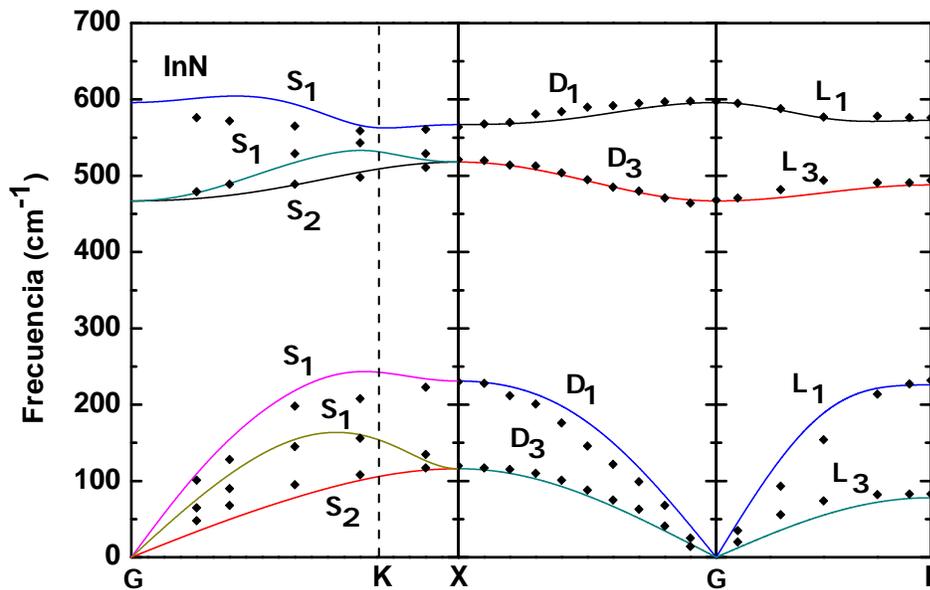


Figura 2.8: Relaciones de dispersión fonónicas para el InN con estructura zinc blenda. Los puntos (diamantes negros) fueron tomados de cálculos *ab initio* [50].

Capítulo 3

Relaciones de dispersión en el modelo de constantes de fuerza para materiales con estructura wurtzita

3.1. Oscilaciones de la red en materiales con estructura wurtzita

En este capítulo se estudian las oscilaciones de la red en materiales con estructura wurtzita. En esta estructura cristalizan los nitruros del grupo-III en los cuales centraremos nuestro análisis. La estructura wurtzita tiene cuatro átomos en la celda elemental, dos por cada elemento del compuesto en cuestión. En lo adelante a los átomos de (B, Al, Ga e In) los denotaremos por X y a los átomos de Nitrogeno por N. Por su parte las coordenadas de los átomos de la base las denotaremos por $\kappa_X = (0, 0, 0)$, $\kappa_N = (0, 0, uc_0)$, $\kappa'_X = (\frac{1}{2}a_0, \frac{\sqrt{3}}{6}a_0, \frac{1}{2}c_0)$ y $\kappa'_N = (\frac{1}{2}a_0, \frac{\sqrt{3}}{6}a_0, (u - \frac{1}{2})c_0)$. Para obtener las ecuaciones de movimiento basta analizar los vecinos de un átomo de cada elemento y las ecuaciones de movimiento de los dos átomos restantes se obtienen usando las propiedades de simetría de la matriz dinámica (1.11). En este caso para escribir las ecuaciones del movimiento se analizará el átomo del tipo X ubicado en la posición $(0, 0, 0)$ y el átomo de N ubicado en la posición $(0, 0, uc_0)$. Las Tablas 3.1 y 3.2 muestran la posición de la celda elemental de los primeros, segundos y terceros vecinos de los átomos de X y N antes mencionados. Los primeros, segundos y terceros vecinos se denotan por P_i^j , S_i^j y T_i^j respectivamente, donde $j = X, N$ representa si nos estamos refiriendo a un átomo de tipo X o un átomo de tipo N.

Siguiendo el mismo procedimiento utilizado para las estructuras diamante y zinc blenda, se

Vecinos	\vec{R}_n	$ \vec{r}(n, k) $	
Primeros	$P_0^X = (0, 0, 0)$	$P_1^X = (0, 0, 0)$	$\frac{3}{8}c_0$
	$P_2^X = a_0(-1, 0, 0)$	$P_3^X = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	
Segundos	$S_0^X = a_0(1, 0, 0)$	$S_1^X = a_0(1/2, \sqrt{3}/2, 0)$	$\frac{2\sqrt{6}}{3}c_0$
	$S_2^X = a_0(-1/2, \sqrt{3}/2, 0)$	$S_3^X = a_0(-1, 0, 0)$	
	$S_4^X = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	$S_5^X = a_0(1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	
	$S_6^X = (0, 0, 0)$	$S_7^X = a_0(-1, 0, 0)$	
	$S_8^X = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	$S_9^X = (0, 0, -c_0)$	
	$S_{10}^X = a_0(-1, 0, -c_0/a_0)$	$S_{11}^X = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, -c_0/a_0)$	
Terceros	$T_0^X = (0, 0, -c_0)$	$\frac{5}{8}c_0$	

Tabla 3.1: Posición de la celda elemental de los tres primeros vecinos y su distancia al átomo del tipo X ubicado en la posición $(0, 0, 0)$, para una estructura wurtzita con cuatro átomos en la celda elemental.

Vecinos	\vec{R}_n	$ \vec{r}(n, k) $	
Primeros	$P_0^N = (0, 0, 0)$	$P_1^N = (0, 0, 0)$	$\frac{3}{8}c_0$
	$P_2^N = a_0(-1, 0, 0)$	$P_3^N = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	
Segundos	$S_0^N = a_0(1, 0, 0)$	$S_1^N = a_0(1/2, \sqrt{3}/2, 0)$	$\frac{2\sqrt{6}}{3}c_0$
	$S_2^N = a_0(-1/2, \sqrt{3}/2, 0)$	$S_3^N = a_0(-1, 0, 0)$	
	$S_4^N = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	$S_5^N = a_0(1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	
	$S_6^N = a_0(0, 0, c_0/a_0)$	$S_7^N = a_0(-1, 0, c_0/a_0)$	
	$S_8^N = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, c_0/a_0)$	$S_9^N = (0, 0, 0)$	
	$S_{10}^N = a_0(-1, 0, 0)$	$S_{11}^N = a_0(-1/2, -\sqrt{3}/2, 0)$	
Terceros	$T_0^N = (0, 0, c_0)$	$\frac{5}{8}c_0$	

Tabla 3.2: Posición de la celda elemental de los tres primeros vecinos y su distancia al átomo del tipo N ubicado en la posición $(0, 0, uc_0)$, para una estructura wurtzita con cuatro átomos en la celda elemental.

escriben las matrices de constantes de fuerza de interacción entre los diferentes vecinos en su forma más general y se determina el número de constantes de fuerza independientes, aplicando la invariancia de simetría correspondiente en cada caso.

Los primeros vecinos tienen simetría C_{3v} . Tomando P_0^X como punto de simetría tenemos que

$$\Phi_{P_0^X} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Utilizando la invariancia de $\Phi_{P_0^X}$ ante las transformaciones de simetría de C_{3v} se determina cuáles de sus elementos son independientes y distintos de cero, obteniéndose que

$$\Phi_{P_0^X} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Las matrices de constantes de fuerza correspondientes a los restantes primeros vecinos están dadas por

$$\Phi_{P_1^X} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}\alpha_{11} + \frac{2}{3}\alpha_{33} & -\frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ -\frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{7}{9}\alpha_{11} + \frac{2}{9}\alpha_{33} & \frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ \frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{8}{9}\alpha_{11} + \frac{1}{9}\alpha_{33} \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

$$\Phi_{P_2^X} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}\alpha_{11} + \frac{2}{3}\alpha_{33} & \frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & -\frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ \frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{7}{9}\alpha_{11} + \frac{2}{9}\alpha_{33} & \frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ -\frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{8}{9}\alpha_{11} + \frac{1}{9}\alpha_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{P_3^X} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{9}\alpha_{11} + \frac{8}{9}\alpha_{33} & -\frac{2\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ 0 & -\frac{2\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{8}{9}\alpha_{11} + \frac{1}{9}\alpha_{33} \end{pmatrix}.$$

Estas últimas se obtienen aplicando a $\Phi_{P_0^x}$ las transformaciones $C'C_3$, $C'C_3^2$ y C' respectivamente, donde

$$C' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & -\frac{2\sqrt{2}}{3} \\ 0 & \frac{2\sqrt{2}}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Por su parte los segundos vecinos tienen simetría σ_v . Siguiendo el mismo procedimiento que para los primeros vecinos, tomando a S_0 cómo centro de simetría se tiene que las matrices de constantes de fuerza de estos vecinos están dadas por las expresiones

$$\Phi_{S_0^x} = \Phi_{S_3^x} = \begin{pmatrix} \beta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

$$\Phi_{S_1^x} = \Phi_{S_4^x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\beta_{11} + \frac{3}{4}\beta_{22} & \frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} - \beta_{22}) & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} - \beta_{22}) & \frac{3}{4}\beta_{11} + \frac{1}{4}\beta_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_2^x} = \Phi_{S_5^x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\beta_{11} + \frac{3}{4}\beta_{22} & -\frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} - \beta_{22}) & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} - \beta_{22}) & \frac{3}{4}\beta_{11} + \frac{1}{4}\beta_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_6^x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\beta_{11} + \beta_{22} + 6\beta_{33}) & -\frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & \frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & \frac{1}{4}(-\beta_{11} + 3\beta_{22} + 2\beta_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ -\frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & 2\beta_{11} - \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_7^x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\beta_{11} + \beta_{22} + 6\beta_{33}) & \frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & -\frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & \frac{1}{4}(-\beta_{11} + 3\beta_{22} + 2\beta_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ \frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & 2\beta_{11} - \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_8^X} = \begin{pmatrix} \beta_{22} & 0 & 0 \\ 0 & -\beta_{11} + 2\beta_{33} & \sqrt{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ 0 & -\sqrt{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & 2\beta_{11} - \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_9^X} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\beta_{11} + \beta_{22} + 6\beta_{33}) & -\frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & -\frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & \frac{1}{4}(-\beta_{11} + 3\beta_{22} + 2\beta_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ \frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & 2\beta_{11} - \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_{10}^X} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\beta_{11} + \beta_{22} + 6\beta_{33}) & \frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & \frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\beta_{11} + \beta_{22} - 2\beta_{33}) & \frac{1}{4}(-\beta_{11} + 3\beta_{22} + 2\beta_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ -\frac{\sqrt{6}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & 2\beta_{11} - \beta_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_{11}^X} = \begin{pmatrix} \beta_{22} & 0 & 0 \\ 0 & -\beta_{11} + 2\beta_{33} & -\sqrt{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) \\ 0 & \sqrt{2}(\beta_{11} - \beta_{33}) & 2\beta_{11} - \beta_{33} \end{pmatrix}.$$

Estas últimas se obtienen a partir de $\Phi_{S_8^X}$ aplicando las transformaciones $C_6, C_3, C_2, C_3^2, C_6^5, C''C_3, C''C_3^2, C'', C'''C_3, C'''C_3^2$ y C''' respectivamente, donde

$$C'' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & 0 & -\frac{\sqrt{6}}{3} \\ \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix}, C''' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} \\ -\frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

El tercer vecino T_0^X está ubicado en el eje z, por tanto la matriz de constantes de fuerza $\Phi_{T_0^X}$ es invariante ante una rotación en ese eje, adoptando la forma

$$\Phi_{T_0^X} = \begin{pmatrix} \delta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Aprovechando la propiedad de simetría (1.8) se obtiene la matriz de constantes de fuerza $\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa_X, n\kappa_X)$.

$$\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa_X, n\kappa_X) = \begin{pmatrix} \Phi_{11}(n\kappa_X, n\kappa_X) & 0 & 0 \\ 0 & \Phi_{11}(n\kappa_X, n\kappa_X) & 0 \\ 0 & 0 & \Phi_{33}(n\kappa_X, n\kappa_X) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

donde

$$\begin{aligned} \Phi_{11}(n\kappa_X, n\kappa_X) &= -\left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + 6\beta_{11} + 6\beta_{33} + \delta_{11}\right), \\ \Phi_{33}(n\kappa_X, n\kappa_X) &= -\left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + 12\beta_{22} + \delta_{33}\right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Haciendo iguales consideraciones se obtienen las matrices de constantes de fuerza con el átomo de tipo N . De esta forma se tiene que las matrices de constantes de fuerza de los primeros vecinos están dadas por

$$\begin{aligned} \Phi_{P_0^N} &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{P_1^N} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3}\alpha_{11} + \frac{2}{3}\alpha_{33} & -\frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & -\frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ -\frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{7}{9}\alpha_{11} + \frac{2}{9}\alpha_{33} & -\frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ -\frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{8}{9}\alpha_{11} + \frac{1}{9}\alpha_{33} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{P_2^N} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3}\alpha_{11} + \frac{2}{3}\alpha_{33} & \frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ \frac{2\sqrt{3}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{7}{9}\alpha_{11} + \frac{2}{9}\alpha_{33} & -\frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ \frac{\sqrt{6}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{8}{9}\alpha_{11} + \frac{1}{9}\alpha_{33} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{P_3^N} &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{9}\alpha_{11} + \frac{8}{9}\alpha_{33} & \frac{2\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) \\ 0 & \frac{2\sqrt{2}}{9}(\alpha_{11} - \alpha_{33}) & \frac{8}{9}\alpha_{11} + \frac{1}{9}\alpha_{33} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

De igual modo para los segundos vecinos del átomo de tipo N se tienen las matrices de constantes de fuerza

$$\Phi_{S_0^N} = \Phi_{S_3^N} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{33} \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

$$\Phi_{S_1^N} = \Phi_{S_4^N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\gamma_{11} + \frac{3}{4}\gamma_{22} & \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} - \gamma_{22}) & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} - \gamma_{22}) & \frac{3}{4}\gamma_{11} + \frac{1}{4}\gamma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_2^N} = \Phi_{S_5^N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\gamma_{11} + \frac{3}{4}\gamma_{22} & -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} - \gamma_{22}) & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} - \gamma_{22}) & \frac{3}{4}\gamma_{11} + \frac{1}{4}\gamma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_6^N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\gamma_{11} + \gamma_{22} + 6\gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & \frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & \frac{1}{4}(-\gamma_{11} + 3\gamma_{22} + 2\gamma_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ -\frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & 2\gamma_{11} - \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_7^N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\gamma_{11} + \gamma_{22} + 6\gamma_{33}) & \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & \frac{1}{4}(-\gamma_{11} + 3\gamma_{22} + 2\gamma_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ \frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & 2\gamma_{11} - \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_8^N} = \begin{pmatrix} \gamma_{22} & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_{11} + 2\gamma_{33} & \sqrt{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ 0 & -\sqrt{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & 2\gamma_{11} - \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_9^N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\gamma_{11} + \gamma_{22} + 6\gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & \frac{1}{4}(-\gamma_{11} + 3\gamma_{22} + 2\gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ \frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & 2\gamma_{11} - \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_{i0}^N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-3\gamma_{11} + \gamma_{22} + 6\gamma_{33}) & \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & \frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_{11} + \gamma_{22} - 2\gamma_{33}) & \frac{1}{4}(-\gamma_{11} + 3\gamma_{22} + 2\gamma_{33}) & -\frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ -\frac{\sqrt{6}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & \frac{\sqrt{2}}{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & 2\gamma_{11} - \gamma_{33} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{S_{i1}^N} = \begin{pmatrix} \gamma_{22} & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_{11} + 2\gamma_{33} & -\sqrt{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) \\ 0 & \sqrt{2}(\gamma_{11} - \gamma_{33}) & 2\gamma_{11} - \gamma_{33} \end{pmatrix}.$$

Por su parte para el tercer vecino y $\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa_N, n\kappa_N)$, se tienen

$$\Phi_{T_0^N} = \begin{pmatrix} \delta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \delta_{33} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

y

$$\Phi_{\alpha\beta}(n\kappa_N, n\kappa_N) = \begin{pmatrix} \Phi_{11}(n\kappa_N, n\kappa_N) & 0 & 0 \\ 0 & \Phi_{11}(n\kappa_N, n\kappa_N) & 0 \\ 0 & 0 & \Phi_{33}(n\kappa_N, n\kappa_N) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

donde

$$\begin{aligned} \Phi_{11}(n\kappa_N, n\kappa_N) &= -\left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + 6\gamma_{11} + 6\gamma_{33} + \delta_{11}\right), \\ \Phi_{33}(n\kappa_N, n\kappa_N) &= -\left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + 12\gamma_{22} + \delta_{33}\right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Tabla 3.3: Frecuencias en los puntos de alta simetría Γ y A de BN, AlN, GaN y InN en la estructura wurtzita. Todos los datos están dados en cm^{-1} .

$\omega(\text{cm}^{-1})$	E_2^1	B_1^1	$A_1(TO)$	$E_1(TO)$	E_2^2	B_2^1	$A_1(LO)$	$E_1(LO)$	A_{LA}	A_{LO}	A_{TA}	A_{TO}
BN												
a	448	917	982	1019	944	1179	1257	1287	608	1244	316	985
g	474	963	1006	1053	948	1125	1258	1281	632	1222	339	998
h	475	982	1043	1075	979	1134	1280	1293	669	1222	365	1017
$\Delta\omega$	27	65	56	34	35	54	23	12	61	22	49	32
AlN												
a	225	553	648	657	674	776	893	936	354	851	172	665
b	249	542	610	669	656	742	891	912	336	835	163	664
c	233	547	614	666	655	719	875	898	346	817	167	659
$\Delta\omega$	24	11	38	12	19	57	18	38	18	34	9	6
GaN												
d	138	331	534	551	563	701	728	738	232	715	107	559
a	137	339	546	555	592	717	732	741	235	726	108	572
c	138	334	550	572	574	690	733	737	234	711	104	572
$\Delta\omega$	1	8	16	21	29	17	5	4	3	15	3	13
InN												
c	83	225	443	467	483	576	586	595	156	585	62	472
e	87	216	447	476	488	562	586	593	148	580	61	481
f	93	202	443	470	492	568	589	605	135	581	57	480
$\Delta\omega$	10	23	4	9	9	14	3	12	21	5	5	9

a) Ref.[9]: Modelo adiabático de la carga ligada, b) Ref.[7], e) Ref.[56], f) Ref.[53]: Dispersión Raman, c) Ref.[54], g) Ref.[12], h) Ref.[52]: *ab initio*, d) Ref.[55]: Dispersión Inelástica de Rayos X.

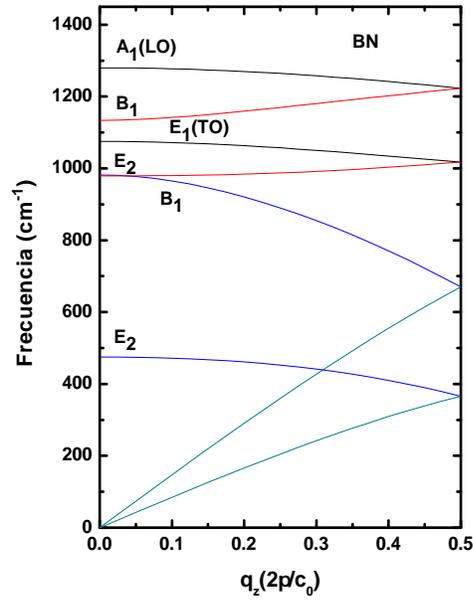


Figura 3.1: Relaciones de dispersión fonónicas para el BN con estructura wurtzita.

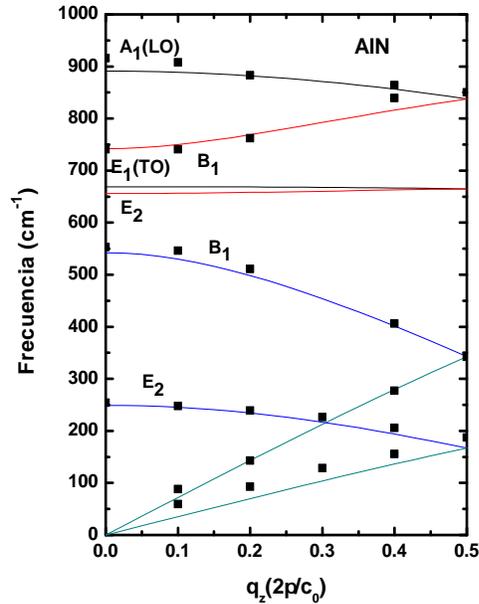


Figura 3.2: Relaciones de dispersión fonónicas para el AlN con estructura wurtzita. Los cuadros negros representan puntos experimentales determinados por espectroscopía Raman [57].

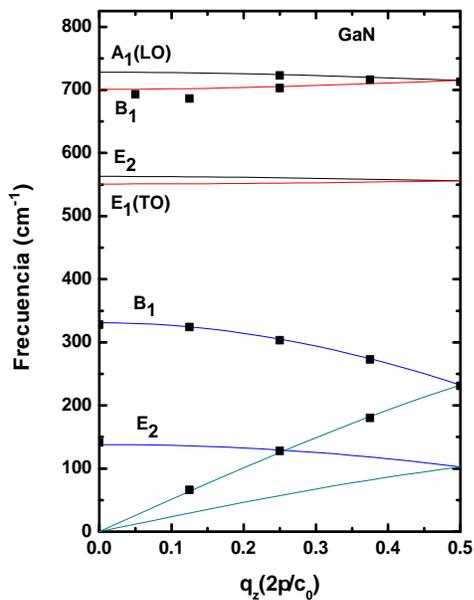


Figura 3.3: Relaciones de dispersión fonónicas para el GaN con estructura wurtzita. Los cuadros negros representan puntos experimentales determinados por dispersión inelástica de rayos X [55].

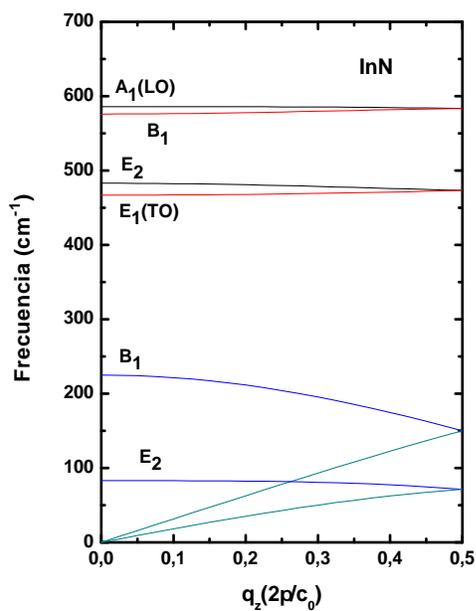


Figura 3.4: Relaciones de dispersión fonónicas para el InN con estructura wurtzita.

Cadena Lineal	Problema 3D Longitudinal	Problema 3D Transversal
κ_{12}^0	$-\left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{1}{3}\alpha_{33} - \Omega(Z_Z)\right)$	$-\left(\frac{5}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33}\right)$
κ_{12}^1	$-\alpha_{33} + \frac{\Omega(Z_Z)}{2}$	$-\alpha_{11}$
κ_{12}^2	$-\delta_{33} + \frac{\Omega(Z_Z)}{2}$	$-\delta_{11}$
κ_{11}^1	$-(12\beta_{11} - 6\beta_{33}) - \Omega(Z_Z)$	$-(-3\beta_{11} + 3\beta_{22} + 6\beta_{33})$
κ_{11}^2	$-(12\gamma_{11} - 6\gamma_{33}) - \Omega(Z_Z)$	$-(-3\gamma_{11} + 3\gamma_{22} + 6\gamma_{33})$

Tabla 3.4: Relación entre las constantes de fuerza del problema 3D en la dirección ΓA en la wurtzita y las constantes de fuerza de la cadena lineal equivalente.

Haciendo uso de las matrices de constantes de fuerza se escriben las ecuaciones de movimiento en la dirección $\Gamma A \rightarrow [0001]$. Al igual que los materiales con estructura zinc blenda, los materiales con estructura wurtzita son polares y es necesario añadir a la matriz dinámica la interacción coulombiana de largo alcance, la cual está dada por (2.13). En esta dirección las oscilaciones se desacoplan en cuatro ramas transversales doblemente degeneradas y cuatro ramas longitudinales. Con estas ramas desacopladas también se puede establecer una equivalencia con la cadena lineal diatómica. En este caso como son dos parejas de átomos de la misma especie distribuidos periódicamente dentro de la celda elemental, es necesario desdoblar las ramas acústica y óptica tradicionales de la cadena lineal, en el centro de la zona de Brillouin. En la tabla 3.4 se muestra la relación entre las constantes de fuerza de la cadena lineal y las constantes de fuerza del problema 3D en la estructura wurtzita, considerando la interacción hasta terceros vecinos. Ajustando las frecuencias teóricas en los puntos Γ y A se obtienen las constantes de fuerza de interacción a primeros, segundos y terceros vecinos.

Al igual que en la estructura zinc blenda en la estructura wurtzita el enlace entre los átomos es parcialmente iónico. Esto hace que para describir el desdoblamiento de las frecuencias ópticas en el centro de la zona de Brillouin, sea necesario añadir a la matriz dinámica, como en el caso de la zinc blenda, un término de la forma (2.13). Sin embargo la estructura wurtzita es anisótropa y el tensor de carga efectiva tiene la forma

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} Z_X & 0 & 0 \\ 0 & Z_X & 0 \\ 0 & 0 & Z_Z \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Las expresiones (3.16) muestran la dependencia de las frecuencias ópticas de las constantes de

fuerza. Se ve que el desdoblamiento de las frecuencias transversales ópticas $\omega_{E_1(TO)}$ y $\omega_{A_1(TO)}$ está determinado por las constantes de fuerza del tercer vecino δ_{11} y δ_{33} , que es el que determina la anisotropía de la estructura wurtzita. Por su parte el desdoblamiento entre las ramas $\omega_{E_1(LO)}$ y $\omega_{A_1(LO)}$ está determinado por las constantes de fuerza del tercer vecino y la contribución de la interacción de largo alcance $\Omega(Z_X) = \frac{4\pi e^2}{V\sqrt{m_X m_N}} Z_X^2$ y $\Omega(Z_Z) = \frac{4\pi e^2}{V\sqrt{m_X m_N}} Z_Z^2$.

$$\begin{aligned}\omega_{E_1(TO)}^2 &= -\frac{(m_X + m_N)}{m_X m_N} \left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + \delta_{11} \right), \\ \omega_{A_1(TO)}^2 &= -\frac{(m_X + m_N)}{m_X m_N} \left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + \delta_{33} \right), \\ \omega_{E_1(LO)}^2 &= -\frac{(m_X + m_N)}{m_X m_N} \left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + \delta_{11} + \Omega(Z_X) \right), \\ \omega_{A_1(LO)}^2 &= -\frac{(m_X + m_N)}{m_X m_N} \left(\frac{8}{3}\alpha_{11} + \frac{4}{3}\alpha_{33} + \delta_{33} + \Omega(Z_Z) \right).\end{aligned}\tag{3.16}$$

En las tablas 3.5 y 3.6 se reportan las constantes de fuerza del problema 3D y de las cadenas lineales equivalentes en cada caso. Las frecuencias para el ajuste fueron tomadas de [52], [7],[55] y [53], para los nitruros de Boro, Aluminio, Galio e Indio respectivamente. En las figuras 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4 se representan las relaciones de dispersión determinadas para estos materiales en la dirección ΓA . En el caso del AlN y el GaN las ramas muestran muy buena concordancia con datos experimentales de espectroscopía Raman y dispersión de rayos X respectivamente.

En los capítulos 3 y 4 se determinaron las relaciones de dispersión y las constantes de fuerza en materiales con estructuras tipo diamante (materiales del grupo IV: C, Si, Ge y α -Sn), zinc blenda y wurtzita (nitruros del grupo III: BN, AlN, GaN e InN) en una aproximación de interacción hasta terceros vecinos. Las relaciones de dispersión determinadas en materiales con estructura zinc blenda muestran mejor concordancia con los datos de cálculos *ab initio* y experimentales que las relaciones de dispersión determinadas en materiales con estructura diamante. Esta diferencia en parte está determinada por el hecho de que el modelo de constantes de fuerza describe mejor el enlace parcialmente iónico de la estructura zinc blenda que el enlace covalente de la estructura diamante. Un aspecto destacable es que en las estructuras zinc blenda y wurtzita se obtiene una buena concordancia con los resultados de cálculos *ab initio* y experimentales con que se comparan a pesar de la relativa simplicidad del modelo y el bajo costo computacional de los cálculos. Esto es aun más significativo si se tiene en cuenta que resultados de cálculos *ab initio* en estos materiales tienen discordancias ($\Delta\omega$) entre sí y con resultados experimentales de hasta 50 cm^{-1} y 60 cm^{-1} , ver tablas 2.11 y 3.3. En los últimos dos capítulos

Constantes de Fuerza	BN	AlN	GaN	InN
α_{11}	-1.9163	-0.9274	-0.0311	-0.6982
α_{33}	-3.6804	-3.1535	-4.4021	-1.9829
$2\beta_{11} - \beta_{33}$	-0.0885	0.5076	0.6575	0.3821
$-\beta_{11} + \beta_{22} + 2\beta_{33}$	-0.0717	1.5479	0.9792	0.8423
$2\gamma_{11} - \gamma_{33}$	-0.0563	-0.0358	-0.0311	-0.0182
$-\gamma_{11} + \gamma_{22} + 2\gamma_{33}$	0.0646	-0.0230	-0.0082	-0.0027
δ_{11}	-0.5247	0.0079	0.0085	-0.0074
δ_{33}	0.0936	-0.0190	-0.0166	-0.0000
$\Omega(Z_X)$	-2.3546	-2.6482	-2.1020	-1.3546
$\Omega(Z_Z)$	-2.5112	-2.9074	-2.1350	-1.4063

Tabla 3.5: Constantes de fuerza del problema 3D para cristales de BN, AlN, GaN y InN con estructura wurtzita. Las unidades están dadas en 10^5 dyn/cm.

Constantes de Fuerza		κ_{12}^0	κ_{12}^1	κ_{12}^2	κ_{11}^1	κ_{22}^1
BN	L[0001]	8.8481	2.4248	-1.3491	3.0424	2.8489
	T[0001]	8.1010	1.9163	0.5247	0.2151	-0.1938
AlN	L[0001]	6.4317	1.6998	-3.0016	3.1222	3.0456
	T[0001]	5.7504	0.9274	-0.5076	-0.0236	0.0571
GaN	L[0001]	3.6854	3.3346	-2.0467	2.3216	2.1844
	T[0001]	5.9213	0.0311	-0.6575	-0.0256	0.0498
InN	L[0001]	3.9292	1.2798	-1.5455	1.5153	1.4223
	T[0001]	3.8076	0.6982	-0.3821	0.0221	0.0001

Tabla 3.6: Constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes a los modos longitudinal y transversal desacoplados en la dirección ΓA , en nitruro de Boro, Aluminio, Galio e Indio con estructura wurtzita. Las unidades están dadas en 10^5 dyn/cm.

se han estudiado las oscilaciones de la red en materiales con estructura diamante, zinc blenda y wurtzita. En el próximo capítulo estudiaremos las oscilaciones en sus heteroestructuras.

Capítulo 4

Modos polares ópticos en nanohilos revestidos

4.1. Introducción

En este capítulo estudiaremos las oscilaciones en heteroestructuras. Particularmente nanohilos de un material semiconductor, revestidos en otro material semiconductor. Como se sabe, el conocimiento de los modos de oscilación ópticos es esencial para entender las propiedades ópticas y de transporte de tales sistemas. Entre los enfoques más productivos para investigar las características de estas excitaciones se encuentran los modelos fenomenológicos continuos. En el libro clásico de Born y Huang probablemente se trate el primer antecedente en este sentido [1]. No obstante, hay que mencionar que distintos autores han propuesto diversas opciones y variantes de cómo tratar las ecuaciones que rigen estas oscilaciones para las heteroestructuras; ver, por ejemplo las Refs. [58, 59]. Nosotros nos adscribimos al modelo fenomenológico completo propuesto originalmente por Trallero y colaboradores [31]. En este modelo las oscilaciones se describen mediante un campo vectorial \vec{u} , que representa el desplazamiento relativo entre los dos iones de la celda elemental, y un potencial eléctrico φ . En este modelo haciendo uso de una formulación Lagrangiana, se tiene en cuenta el acoplamiento entre el desplazamiento mecánico \vec{u} y el potencial φ antes mencionados, obteniéndose las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned}\rho_m \ddot{\vec{u}} &= -\rho_m \omega_{TO}^2 \vec{u} - \alpha \nabla \varphi - \nabla \cdot \vec{\sigma}, \\ 0 &= \nabla \cdot (\epsilon_\infty \nabla \varphi - 4\pi \alpha \vec{u}),\end{aligned}\tag{4.1}$$

donde

$$\sigma_{ij} = \rho_m(\beta_L^2 - 2\beta_T^2)(\nabla \cdot \vec{u})\delta_{ij} + \rho_m\beta_T^2(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i). \quad (4.2)$$

Este tensor tiene las mismas propiedades de simetría que un tensor de esfuerzos, pero no debe confundirse con el tensor de esfuerzos de la teoría de la elasticidad ya que está definido a partir del desplazamiento relativo \vec{u} de los iones. Si se considera dependencia armónica $\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$, $\varphi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$ y se escribe la divergencia de $\vec{\sigma}$ en forma explícita, las ecuaciones (4.1) toman la forma

$$\begin{aligned} \rho_m(\omega^2 - \omega_{TO}^2)\vec{u} &= \rho_m\beta_L^2\nabla(\nabla \cdot \vec{u}) - \rho_m\beta_T^2\nabla \times \nabla \times \vec{u} + \alpha\nabla\varphi, \\ \nabla^2\varphi &= \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty}\nabla \cdot \vec{u}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

donde ω_{TO} es la frecuencia transversal óptica en el volumen, ρ_m es la densidad de masa reducida, β_L y β_T las parabolicidades de los modos longitudinales y transversales y α está dada por la relación

$$\alpha^2 = \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)\rho_m\omega_{TO}^2}{4\pi}. \quad (4.4)$$

Las ecuaciones (4.3) son una generalización de las ecuaciones de Born y Huang [1].

4.2. Modelo fenomenológico continuo en simetría cilíndrica

Las ecuaciones (4.3) constituyen un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales acopladas. La solución de este sistema de ecuaciones puede ser encontrada con ayuda de las funciones auxiliares Λ (escalar) y $\vec{\Gamma}$ (vectorial), tales que

$$\begin{aligned} \Lambda &= \nabla \cdot \vec{u}, \\ \vec{\Gamma} &= \nabla \times \vec{u}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Sustituyendo las expresiones (4.5) en las ecuaciones (4.3) y haciendo algunas transformaciones algebraicas se tiene que

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \vec{\Gamma} + Q_T^2 \vec{\Gamma} &= \vec{0}, \\
\nabla^2 \Lambda + Q_L^2 \Lambda &= 0, \\
\varphi &= \varphi_H - \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty Q_L^2} \Lambda,
\end{aligned} \tag{4.6}$$

donde φ_H es la solución de la ecuación de Laplace $\nabla^2 \varphi_H = 0$ y Q_T, Q_L están dadas por

$$\begin{aligned}
Q_T^2 &= \frac{\omega_{TO}^2 - \omega^2}{\beta_T^2}, \\
Q_L^2 &= \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\beta_L^2}.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

De igual modo sustituyendo (4.5) y (4.7) en la ecuación (4.3) se tiene que

$$\vec{u} = -\nabla \left[\frac{\alpha}{\rho_m \beta_T^2 Q_T^2} \varphi_H + \frac{\Lambda}{Q_L^2} \right] + \frac{1}{Q_T^2} \nabla \times \vec{\Gamma}. \tag{4.8}$$

Para un caso dado es necesario obtener las soluciones generales de las ecuaciones de Helmholtz para Λ y $\vec{\Gamma}$ y la ecuación de Laplace para φ_H . Las funciones Λ y φ_H se obtienen como soluciones de las ecuaciones correspondientes por los métodos tradicionales. Por su parte la función $\vec{\Gamma}$ se obtiene como una combinación lineal de las funciones vectoriales \vec{M} y \vec{N} , dadas por las expresiones

$$\begin{aligned}
\vec{M} &= \nabla \times (v_1 \vec{k}), \\
\vec{N} &= \frac{1}{Q_T^2} \nabla \times \nabla \times (v_2 \vec{k}),
\end{aligned} \tag{4.9}$$

donde $v_i, (i = 1, 2)$ son dos soluciones linealmente independientes de la ecuación (4.10) y \vec{k} es un vector constante; ver Ref. [60].

$$\nabla^2 v_i + Q_T^2 v_i = 0. \tag{4.10}$$

Una vez obtenidas las funciones Λ, Γ y φ_H se tiene la solución general del problema. En el caso particular de sistemas con simetría cilíndrica los modos pueden ser caracterizados por el vector de onda a lo largo de la dirección z, k_z , y un entero no negativo n que da la dependencia

angular de los modos, además es conveniente tomar $\vec{k} = \vec{e}_z$ [60]. Por comodidad la solución general se escribe como un campo de cuatro componentes F , cuyas componentes son las tres componentes del desplazamiento mecánico \vec{u} y el potencial electrostático φ . De esta forma para el espacio de soluciones se tiene el siguiente conjunto de funciones base

$$\begin{aligned}
F_{T1} &= \begin{pmatrix} \vec{u}_{T1} \\ \varphi_{T1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{ik_z}{q_T} f'_n(q_T \rho) \\ -\frac{nk_z}{q_T} \frac{1}{q_T \rho} f_n(q_T \rho) \\ f_n(q_T \rho) \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(n\theta + k_z z)} \\
F_{T2} &= \begin{pmatrix} \vec{u}_{T2} \\ \varphi_{T2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{in}{q_T \rho} f_n(q_T \rho) \\ -f'_n(q_T \rho) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(n\theta + k_z z)} \\
F_L &= \begin{pmatrix} \vec{u}_L \\ \varphi_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f'_n(q_L \rho) \\ \frac{in}{q_L \rho} f_n(q_L \rho) \\ \frac{ik_z}{q_L} f_n(q_L \rho) \\ \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} \frac{1}{q_L} f_n(q_L \rho) \end{pmatrix} e^{i(n\theta + k_z z)} \\
F_H &= \begin{pmatrix} \vec{u}_H \\ \varphi_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g'_n(k_z \rho) \\ \frac{in}{k_z \rho} g_n(k_z \rho) \\ g_n(k_z \rho) \\ -\frac{\rho_m \beta_T^2 q_T^2}{\alpha} \frac{1}{k_z} g_n(k_z \rho) \end{pmatrix} e^{i(n\theta + k_z z)}.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

De estas funciones base se obtiene directamente que $\nabla \cdot \vec{u}_{T1} = \nabla \cdot \vec{u}_{T2} = 0$ y $\nabla \times \vec{u}_L = \vec{0}$, lo cual determina el carácter transversal y longitudinal de los elementos $T1, T2$ y L respectivamente. Esta base ya fue usada por Comas *et al.* [36] en estudio de los modos en nanohilos, en un caso más simple, con $k_z = 0$. Las funciones f_n están dadas por el signo del argumento $q_{L,T}^2$ y por la región del espacio que estemos considerando, o sea

$$f_n = \begin{cases} A \left(\frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] + 1}{2} J_n - \frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] - 1}{2} I_n \right); & \rho < a \\ A \left(\frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] + 1}{2} J_n - \frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] - 1}{2} I_n \right) + B \left(\frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] + 1}{2} N_n - \frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] - 1}{2} K_n \right); & a < \rho < b \\ B \left(\frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] + 1}{2} N_n - \frac{\text{sign}[q_{L,T}^2] - 1}{2} K_n \right); & \rho > b \end{cases} \tag{4.12}$$

donde *sign* representa la función signo y las expresiones J_n , N_n , I_n y K_n las funciones de Bessel, Neumann, Infeld y MacDonald respectivamente [61]. Para las funciones g_n sólo es necesario tener en cuenta la región del espacio que estemos estudiando, ver (4.13)

$$g_n = \begin{cases} AI_n; & \rho < a \\ AI_n + BK_n; & a < \rho < b \\ BK_n; & \rho > b \end{cases} \quad (4.13)$$

De esta forma se tiene que, al aplicar el modelo fenomenológico continuo (4.3) a un sistema con simetría cilíndrica, la solución se expresa como una combinación lineal de las funciones base (4.11). En las sub-secciones siguientes estudiaremos un “nanohilo revestido”, en coordenadas cilíndricas (ρ, θ, z) . Este sistema sería modelado como sigue: en las regiones $\rho < a$ y $a < \rho < b$ tendríamos dos materiales semiconductores, los cuales etiquetaremos “c” (“core”) y “s” (“shell”) respectivamente, y en la región $\rho > b$ un medio dieléctrico infinito, el cual no toma parte en las oscilaciones y se describe a través de su constante dieléctrica $\epsilon_\infty^{(D)}$ (lo etiquetaremos D). En los sistemas que estudiaremos se tienen dos interfaces cilíndricas $\rho = a$ y $\rho = b$. Para obtener la solución particular de un problema concreto es necesario imponer condiciones de empalme en las interfaces, imponiéndose la continuidad del potencial eléctrico φ y la componente normal del vector de inducción eléctrica \vec{D} . Por su parte para el desplazamiento mecánico adoptaremos la condición de confinamiento mecánico, o sea, $\vec{u}|_S = 0$. Esta condición es válida cuando las frecuencias propias de oscilación de los materiales que forman la interface no se solapan. Además las magnitudes físicas \vec{u} y φ deben ser acotadas en todo el espacio. Las condiciones de empalme antes mencionadas se resumen en las ecuaciones

$$\begin{aligned} \vec{u}|_S &= 0, \\ \varphi^-|_S &= \varphi^+|_S, \\ \epsilon_\infty^- \frac{\partial \varphi^-}{\partial \rho} &= \epsilon_\infty^+ \frac{\partial \varphi^+}{\partial \rho}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

En las ecuaciones (4.14) los símbolos - (+) representan la evaluación de las cantidades involucradas, en el interior y el exterior de la interface circular respectivamente. En la figura 4.1 se muestra un esquema de las interfaces cilíndricas del nanohilo revestido.

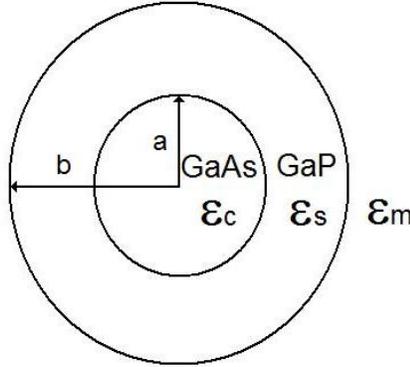


Figura 4.1: Esquema de la sección transversal del nanohilo revestido. En la figura ϵ_c , ϵ_s y ϵ_m representan las constantes dieléctricas del “core”, el “shell” y el medio exterior, respectivamente

Teniendo en cuenta (4.12) y (4.13) tenemos que de forma general las oscilaciones en el “core” dependen de cuatro constantes arbitrarias ($A_{T1}^{(c)}$, $A_{T2}^{(c)}$, $A_L^{(c)}$ y $A_H^{(c)}$). En el “shell” dependen de ocho constantes ($A_{T1}^{(s)}$, $B_{T1}^{(s)}$, $A_{T2}^{(s)}$, $B_{T2}^{(s)}$, $A_L^{(s)}$, $B_L^{(s)}$, $A_H^{(s)}$ y $B_H^{(s)}$), y en el dieléctrico de una constante $B_H^{(D)}$. De este modo aplicando las condiciones de frontera (4.14) se obtienen dos problemas seculares independientes (4.15) y (4.17) para el “core” y el “shell” respectivamente. En ambos casos $B_H^{(D)}$ se ha escrito en términos de las demás constantes arbitrarias. Es importante hacer notar que cuando se estudian los modos en el “core” se considera $\vec{u} \equiv 0$ para ($a < \rho < b$), igualmente cuando se estudian los modos en el “shell” se considera $\vec{u} \equiv 0$ para ($\rho < a$). Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores se tiene que los modos en el “core” se obtienen de la ecuación secular

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} & 0 & 0 \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} & 0 & 0 \\ m_{31} & 0 & m_{33} & m_{34} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{43} & m_{44} & m_{45} & m_{46} \\ 0 & 0 & m_{53} & m_{54} & m_{55} & m_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_{65} & m_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{T1}^{(c)} \\ A_{T2}^{(c)} \\ A_L^{(c)} \\ A_H^{(c)} \\ A_H^{(s)} \\ B_H^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

donde $t_c = q_T a$, $l_c = q_T a$, $k_a = k_z a$, $\gamma = b/a$

$$\begin{aligned} m_{11} &= \frac{k_a}{t_c} J'_n(t_c), m_{12} = \frac{n}{t_c} J_n(t_c), m_{13} = J'_n(l_c), m_{14} = I'_n(k_a), m_{21} = \frac{nk_a}{t_c^2} J_n(t_c), m_{22} = J'_n(t_c), \\ m_{23} &= \frac{n}{l_c} J_n(l_c), m_{24} = \frac{n}{k_a} I_n(k_a), m_{31} = -J_n(t_c), m_{33} = \frac{k_a}{l_c} J_n(l_c), m_{34} = I_n(k_a), m_{43} = \frac{k_a}{l_c} J_n(l_c), \\ m_{44} &= -\frac{\omega_{TO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2} \frac{\epsilon_\infty^{(c)}}{\epsilon_0^{(c)} - \epsilon_\infty^{(c)}} I_n(k_a), m_{45} = \epsilon_\infty^{(c)} I_n(k_a), m_{46} = \epsilon_\infty^{(c)} K_n(k_a), m_{53} = J'_n(l_c), \\ m_{54} &= -\frac{\omega_{TO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2} \frac{\epsilon_\infty^{(c)}}{\epsilon_0^{(c)} - \epsilon_\infty^{(c)}} I'_n(k_a), m_{55} = \epsilon_\infty^{(s)} I'_n(k_a), m_{56} = \epsilon_\infty^{(s)} K'_n(k_a), \\ m_{65} &= \epsilon_\infty^{(D)} I_n(\gamma k_a) K'_n(\gamma k_a) - \epsilon_\infty^{(s)} I'_n(\gamma k_a) K_n(\gamma k_a), m_{66} = (\epsilon_\infty^{(D)} - \epsilon_\infty^{(s)}) K'_n(\gamma k_a) K_n(\gamma k_a). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Para los modos en el “shell” la ecuación secular adopta la forma

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} & m_{15} & m_{16} & m_{17} & m_{18} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} & m_{25} & m_{26} & m_{27} & m_{28} \\ m_{31} & m_{32} & 0 & 0 & m_{35} & m_{36} & m_{37} & m_{38} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} & m_{45} & m_{46} & m_{47} & m_{48} \\ m_{51} & m_{52} & m_{53} & m_{54} & m_{55} & m_{56} & m_{57} & m_{58} \\ m_{61} & m_{53} & 0 & 0 & m_{65} & m_{66} & m_{67} & m_{68} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_{75} & m_{76} & m_{77} & m_{78} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_{85} & m_{86} & m_{87} & m_{88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{T1}^{(s)} \\ B_{T1}^{(s)} \\ A_{T2}^{(s)} \\ B_{T2}^{(s)} \\ A_L^{(s)} \\ B_L^{(s)} \\ A_H^{(s)} \\ B_H^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

donde $t_s = q_T a$, $l_s = q_T a$, $k_a = k_z a$, $\gamma = b/a$ y

$$\begin{aligned}
m_{11} &= \frac{k_a}{t_s} J'_n(t_s), m_{12} = \frac{k_a}{t_s} N'_n(t_s), m_{13} = \frac{n}{t_s} J_n(t_s), m_{14} = \frac{n}{t_s} N_n(t_s), m_{15} = J'_n(l_s), & (4.18) \\
m_{16} &= N'_n(l_s), m_{17} = I'_n(k_a), m_{18} = K'_n(k_a), m_{21} = \frac{nk_a}{t_s^2} J_n(t_s), m_{22} = \frac{nk_a}{t_s^2} N_n(t_s), \\
m_{23} &= J'_n(t_s), m_{24} = N'_n(t_s), m_{25} = \frac{k_a}{l_s} J_n(l_s), m_{26} = \frac{k_a}{l_s} N_n(l_s), m_{27} = \frac{n}{k_a} I_n(k_a), \\
m_{28} &= \frac{n}{k_a} K_n(k_a), m_{31} = -J_n(t_s), m_{32} = -N_n(t_s), m_{35} = \frac{k_a}{l_s} J_n(l_s), m_{36} = \frac{k_a}{l_s} N_n(l_s), \\
m_{37} &= I_n(k_a), m_{38} = K_n(k_a), m_{41} = \frac{k_a}{t_s} J'_n(\gamma t_s), m_{42} = \frac{k_a}{t_s} N'_n(\gamma t_s), m_{43} = \frac{n}{t_s} J_n(\gamma t_s), \\
m_{44} &= \frac{n}{t_s} N_n(\gamma t_s), m_{45} = J'_n(\gamma l_s), m_{46} = N'_n(\gamma l_s), m_{47} = I'_n(\gamma k_a), m_{48} = K'_n(\gamma k_a), \\
m_{51} &= \frac{nk_a}{\gamma t_s^2} J_n(\gamma t_s), m_{52} = \frac{nk_a}{\gamma t_s^2} N_n(\gamma t_s), m_{53} = J'_n(\gamma t_s), m_{54} = N'_n(\gamma t_s), m_{55} = \frac{k_a}{l_s} J_n(\gamma l_s), \\
m_{56} &= \frac{k_a}{l_s} N_n(\gamma l_s), m_{57} = \frac{n}{\gamma k_a} I_n(\gamma k_a), m_{58} = \frac{n}{\gamma k_a} K_n(\gamma k_a), m_{61} = -J_n(\gamma t_s), \\
m_{62} &= -N_n(\gamma t_s), m_{65} = \frac{k_a}{l_s} J_n(\gamma l_s), m_{66} = \frac{k_a}{l_s} N_n(\gamma l_s), m_{67} = I_n(\gamma k_a), m_{68} = K_n(\gamma k_a), \\
m_{75} &= I_n(k_a) J'_n(l_s) - \frac{\epsilon_\infty^{(c)}}{\epsilon_\infty^{(s)}} \frac{k_a}{l_s} I'_n(k_a) J_n(l_s), m_{76} = I_n(k_a) N'_n(l_s) - \frac{\epsilon_\infty^{(c)}}{\epsilon_\infty^{(s)}} \frac{k_a}{l_s} I'_n(k_a) N_n(l_s), \\
m_{77} &= \frac{(\epsilon_\infty^{(c)} - \epsilon_\infty^{(s)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} I_n(k_a) I'_n(k_a), \\
m_{78} &= \frac{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} (\epsilon_\infty^{(c)} I'_n(k_a) K_n(k_a) - \epsilon_\infty^{(s)} I_n(k_a) K'_n(k_a)), \\
m_{85} &= K_n(\gamma k_a) J'_n(\gamma l_s) - \frac{\epsilon_\infty^{(D)}}{\epsilon_\infty^{(s)}} \frac{k_a}{l_s} K'_n(\gamma k_a) J_n(\gamma l_s), \\
m_{86} &= K_n(\gamma k_a) N'_n(\gamma l_s) - \frac{\epsilon_\infty^{(D)}}{\epsilon_\infty^{(s)}} \frac{k_a}{l_s} K'_n(\gamma k_a) N_n(\gamma l_s), \\
m_{87} &= \frac{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} (\epsilon_\infty^{(D)} I_n(\gamma k_a) K'_n(\gamma k_a) - \epsilon_\infty^{(s)} I'_n(\gamma k_a) K_n(\gamma k_a)), \\
m_{88} &= \frac{(\epsilon_\infty^{(D)} - \epsilon_\infty^{(s)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} K'_n(\gamma k_a) K_n(\gamma k_a).
\end{aligned}$$

En las secciones siguientes estudiaremos los diferentes casos que se presentan según sean los valores de n y kz . En la tabla 4.1 se muestra el desacoplamiento de los modos en función de los valores de n y kz .

Tabla 4.1: Acoplamiento de los modos en función de los valores de n y k_z .

Modos	$n = 0; k_z = 0$	$n \neq 0; k_z = 0$	$n = 0; k_z \neq 0$	$n \neq 0; k_z \neq 0$
Desacoplados	L, T1, T2	T1	T2	ninguno
Acoplados	ninguno	L, T2	L, T1	L, T1, T2

4.3. Esfuerzos

En las nanoestructuras se produce un cambio en el parámetro de red según sea el tamaño de estas debido a los micro-esfuerzos que se producen en ellas. Esto produce un corrimiento en el valor de las frecuencias de los fonones LO y TO. Una estimación de la influencia del esfuerzo en los modos fonónicos, se puede hacer mediante la fórmula (4.19) [62, 63]

$$\Delta\omega_i = -\gamma_i\omega_i\frac{\Delta V}{V}, \quad (4.19)$$

donde $i = LO, TO$, γ_i es el parámetro de Gruneisen, ω_i la frecuencia del fonón, V es el volumen de la celda unitaria y ΔV es el cambio de volumen de la celda unitaria debido a la variación del parámetro de red, producto de los esfuerzos. Una evaluación del término $\frac{\Delta V}{V}$ se puede hacer a través de la relación

$$\frac{\Delta V}{V} = tr(\varepsilon), \quad (4.20)$$

donde $tr(\varepsilon)$ representa la traza del tensor de deformaciones ε . En el caso de un nanohilo core/shell $tr(\varepsilon)$ puede estimarse a partir de las expresiones (4.21) y (4.22) para el “core” y el “shell” respectivamente [64].

$$\begin{aligned} tr(\varepsilon_{core}) &= -2\varepsilon_{misfit} \left(\frac{(1 + \nu_{core})(1 - 2\nu_{core})(\gamma^2 - 1)}{(1 - \alpha)(1 - 2\nu_{core}) - (1 - 2\nu_{core} + \alpha)\gamma^2} + \frac{\nu_{core}(\gamma^2 - 1)}{(\gamma^2 - 1) + \alpha} \right) \\ &+ \varepsilon_{misfit} \left(\frac{(\gamma^2 - 1)}{(\gamma^2 - 1) + \alpha} \right), \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} tr(\varepsilon_{shell}) &= 2\varepsilon_{misfit} \left(\frac{(1 + \nu_{shell})(1 - 2\nu_{shell})\alpha}{(1 - \alpha)(1 - 2\nu_{shell}) - (1 - 2\nu_{shell} + \alpha)\gamma^2} + \frac{\nu_{shell}\alpha}{(\gamma^2 - 1) + \alpha} \right) \\ &- \varepsilon_{misfit} \frac{\alpha}{(\gamma^2 - 1) + \alpha}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde $\nu_{core}(\nu_{shell})$ representa la razón de Poisson del “core” (“shell”), $\varepsilon_{misfit} = (a_{shell} - a_{core})/a_{core}$ siendo $a_{core}(a_{shell})$ ¹ la constante de la red del core(shell), $\alpha = E_{core}/E_{shell}$ siendo $E_{core}(E_{shell})$ el módulo de Young del “core” (“shell”) y $\gamma = b/a$ la razón entre los radios del “shell” y del “core”. Los parámetros de volumen, de los materiales constituyentes del compuesto core/shell que estudiamos, que aparecen en las expresiones (4.21) y (4.22), así como en el modelo fenomenológico completo, se reportan en la tabla 4.2. Es importante hacer notar que el corrimiento en las frecuencias producido por los esfuerzos (4.19) además de los parámetros físicos de los materiales constituyentes del nanohilo core/shell, sólo depende de la razón $\gamma = b/a$, o sea, para un sistema dado $\Delta\omega_i$ sólo es función de γ . La consideración del efecto de los esfuerzos sobre los modos fonónicos la haremos haciendo en las ecuaciones del modelo las sustituciones

$$\begin{aligned}\omega_{TO}(\gamma) &= \omega_{TO} + \Delta\omega_{TO}(\gamma), \\ \omega_{LO}(\gamma) &= \omega_{LO} + \Delta\omega_{LO}(\gamma).\end{aligned}\tag{4.23}$$

En la figura 4.2 se muestra el corrimiento de las frecuencias LO y TO en el “core” y en el “shell” en función de la razón b/a en un nanohilo core/shell GaAs-GaP.

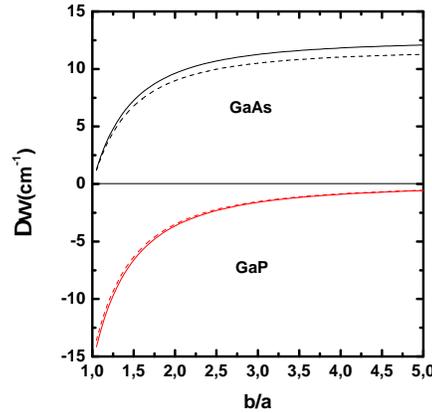


Figura 4.2: Corrimiento de las frecuencias LO y TO en función de $\gamma = b/a$ en un nanohilo core/shell GaAs-GaP. La determinación se hizo a partir de la expresión (4.19). Las líneas continuas representan los corrimientos de las frecuencias transversales y las líneas discontinuas los corrimientos de las frecuencias longitudinales.

¹El subíndice *misfit* significa desajuste.

Tabla 4.2: Parámetros físicos de volumen de los compuestos GaAs y GaP en fase zinc blenda.

Material	GaAs	GaP
ϵ_0	12.80 ^a	11.11 ^a
ϵ_∞^*	10.89(11.26) ^a	9.11(9.15) ^a
ω_{TO} (cm ⁻¹)	267 ^a	365.3 ^a
ω_{LO} (cm ⁻¹)	285 ^a	402.3 ^a
$\beta_T(\times 10^{-6})$	1.70 ^b	0.72 ^c
$\beta_L(\times 10^{-6})$	1.76 ^b	1.60 ^c
γ_{TO}	1.11 ^d	1.09 ^d
γ_{LO}	0.97 ^d	0.95 ^d
E (10 ¹² dyn/cm ²)	0.853 ^d	1.03 ^d
ν	0.312 ^d	0.306 ^d
a_0 (nm)	0.565 ^d	0.545 ^d

a) Ref. [65]; b) Ref. [32]; c) Ref. [66]; d) Ref. [67]. * En los cálculos los valores de ϵ_∞ se corrigieron hasta los valores mostrados entre paréntesis, para que se cumplieran las relaciones de Lyddane-Sachs-Teller.

4.4. Modos polares ópticos en un nanohilo core/shell GaAs-GaP.

En las secciones siguientes se estudian los modos vibracionales en un nanohilo core/shell. Especialmente se analiza el acoplamiento de los modos, la dependencia de la frecuencia con las dimensiones del sistema (radio del “core” y razón b/a) y las relaciones de dispersión (dependen-

cia de la frecuencia con el vector de onda k_z).

4.4.1. Modos con $n = 0$ y $k_z = 0$

En este caso la matriz secular (4.15-4.17) se simplifica considerablemente y tanto en el “core” como en el “shell” el modo longitudinal y los dos modos transversales están desacoplados

Modos en el core

A partir de (4.15) se obtienen para los modos en el “core” las ecuaciones y autofrecuencias siguientes

- Modo longitudinal L

$$J_1(\mu_1^{(m)}) = 0, \quad (4.24)$$

$$\omega_L^2 = \omega_{LO}^2 - (\mu_1^{(m)})^2 \frac{\beta_{Lc}^2}{a^2}, \quad (4.25)$$

donde m numera los modos, $\mu_1^{(m)}$ son las soluciones de (4.24) y a es el radio del core.

- Modo transversal T1

$$J_0(\mu_0^{(m)}) = 0, \quad (4.26)$$

$$\omega_{T1}^2 = \omega_{TO}^2 - (\mu_0^{(m)})^2 \frac{\beta_{Tc}^2}{a^2}, \quad (4.27)$$

donde m numera los modos y $\mu_0^{(m)}$ son las soluciones de (4.26).

- Modo transversal T2

$$J_1(\mu_1^{(m)}) = 0, \quad (4.28)$$

$$\omega_{T2}^2 = \omega_{TO}^2 - (\mu_1^{(m)})^2 \frac{\beta_{Tc}^2}{a^2}, \quad (4.29)$$

donde m numera los modos y $\mu_1^{(m)}$ son las soluciones de (4.28).

Como se puede observar en las expresiones (4.25), (4.27) y (4.29) la frecuencia de estos modos no depende del radio del “shell” como consecuencia del confinamiento. El corrimiento de las frecuencias con relación a las del volumen depende del radio del “core”, de la parabolicidad β

y la raíz de la ecuación secular μ correspondiente en cada caso. Por su parte el efecto de los esfuerzos introduce una dependencia del radio del “shell” (4.23). En la figura 4.3 se muestra la dependencia de los modos con el radio del “core”.

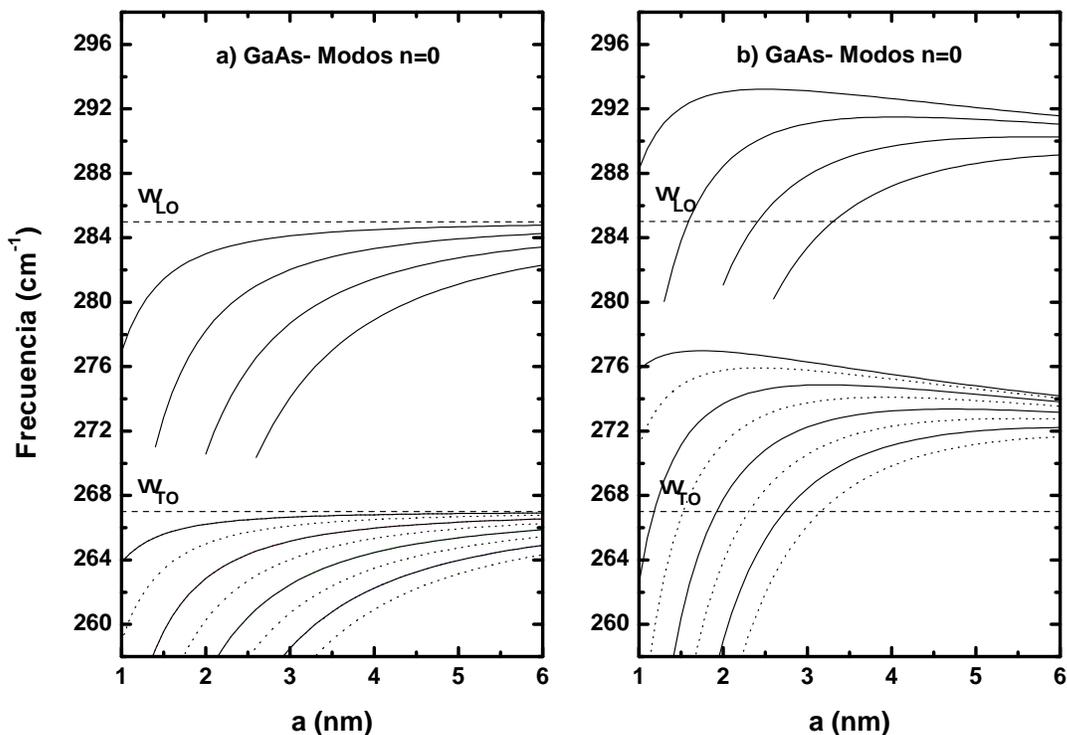


Figura 4.3: Modos con $n = 0$ y $k_z = 0$ en el “core” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función del radio del “core” a . Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos representados en el panel b) se fijó $b - a = 3$ nm. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas.

En la figura 4.3 se observa que el efecto de los esfuerzos en el “core” del nanohilo redunda en un aumento de la frecuencia de los modos. Esto se debe a que la constante de la red del GaAs es mayor que la constante de la red del GaP. Como se puede observar en el panel b), cuando se aumenta el radio del “core” manteniendo fijo el espesor del “shell”, las frecuencias de los modos tienden a las frecuencias TO y LO del volumen, ya que se pierden los efectos del confinamiento y de los esfuerzos.

Modos en el shell

Las ecuaciones y las autofrecuencias para los modos en el shell se obtienen a partir de (4.17) y están dadas por las expresiones

- Modo longitudinal L

$$J_1(\mu_1^{(m)}(\gamma))N_1(\gamma\mu_1^{(m)}(\gamma)) - J_1(\gamma\mu_1^{(m)}(\gamma))N_1(\mu_1^{(m)}(\gamma)) = 0, \quad (4.30)$$

$$\omega_L^2 = \omega_{LO}^2 - (\mu_1^{(m)}(\gamma))^2 \frac{\beta_{Ls}^2}{a^2}, \quad (4.31)$$

donde m numera los modos, $\mu_1^{(m)}(\gamma)$ son las soluciones de (4.30) para un γ dado, a es el radio del core y $\gamma = b/a$ es la razón entre el radio del shell b y el radio del core.

- Modo transversal T1

$$J_0(\mu_0^{(m)}(\gamma))N_0(\gamma\mu_0^{(m)}(\gamma)) - J_0(\gamma\mu_0^{(m)}(\gamma))N_0(\mu_0^{(m)}(\gamma)) = 0, \quad (4.32)$$

$$\omega_{T1}^2 = \omega_{TO}^2 - (\mu_0^{(m)}(\gamma))^2 \frac{\beta_{Ts}^2}{a^2}, \quad (4.33)$$

donde m numera los modos y $\mu_0^{(m)}(\gamma)$ son las soluciones de (4.26) para un γ dado.

- Modo transversal T2

$$J_1(\mu_1^{(m)}(\gamma))N_1(\gamma\mu_1^{(m)}(\gamma)) - J_1(\gamma\mu_1^{(m)}(\gamma))N_1(\mu_1^{(m)}(\gamma)) = 0, \quad (4.34)$$

$$\omega_{T2}^2 = \omega_{TO}^2 - (\mu_1^{(m)}(\gamma))^2 \frac{\beta_{Ts}^2}{a^2}, \quad (4.35)$$

donde m numera los modos y $\mu_1^{(m)}(\gamma)$ son las soluciones de (4.34).

En los modos en el “shell” como se puede observar a partir de las expresiones (4.31), (4.33) y (4.35) la frecuencia de los modos a diferencia del “core” sí depende de la razón entre el radio del “shell” y el radio del “core” ($\gamma = b/a$); esta dependencia está implícita en las raíces $\mu_0^{(m)}(\gamma)$ y $\mu_1^{(m)}(\gamma)$ de las ecuaciones seculares (4.30), (4.32) y (4.34). Respecto al radio del “core” y la parabolicidad β , las frecuencias en el “shell” tienen la misma dependencia que en el “core”. En la figura 4.4 se muestra la dependencia de la frecuencia de estos modos de la razón b/a .

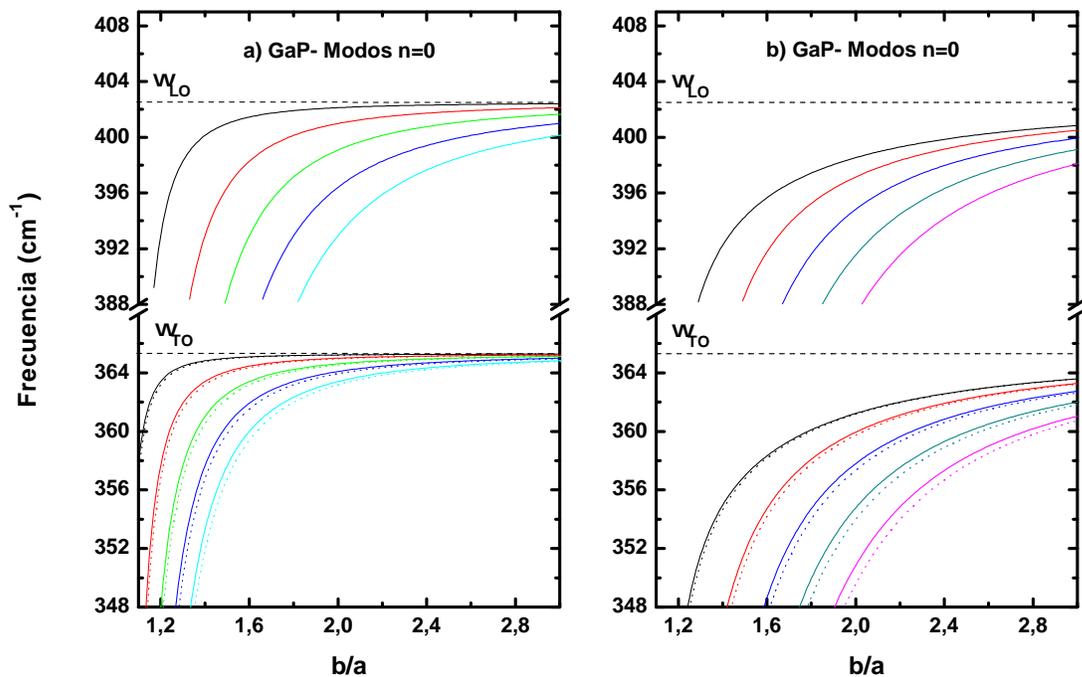


Figura 4.4: Modos con $n = 0$ y $k_z = 0$ en el “shell” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función de la razón b/a . Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos representados en el panel b) se fijó $a = 3$ nm. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas.

En la figura 4.4 se observa que el efecto de los esfuerzos en el “shell” del nanohilo redunda en una disminución de la frecuencia de los modos. Esto se debe a que la constante de la red del GaAs es mayor que la constante de la red del GaP, por tanto se produce el efecto contrario al “core”. Como se puede observar en el panel b), cuando se aumenta la razón γ manteniendo fijo el radio del “core”, las frecuencias de los modos tienden a las frecuencias TO y LO del volumen, como era de esperarse, ya que se pierden los efectos del confinamiento y de los esfuerzos.

4.4.2. Modos con $n \neq 0$ y $k_z = 0$

En este caso las expresiones involucradas se simplifican considerablemente y las funciones bases adoptan la forma

$$\begin{aligned}
 F_{T1} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ f_n(q_T \rho) \\ 0 \end{pmatrix} e^{in\theta} \\
 F_{T2} &= \begin{pmatrix} \frac{in}{q_T \rho} f_n(q_T \rho) \\ -f'_n(q_T \rho) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{in\theta} \\
 \vec{F}_L &= \begin{pmatrix} f'_n(q_L \rho) \\ \frac{in}{q_L \rho} f_n(q_L \rho) \\ 0 \\ \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} \frac{1}{q_L} f_n(q_L \rho) \end{pmatrix} e^{in\theta} \\
 F_H &= \begin{pmatrix} n\rho^{n-1} \\ in\rho^{n-1} \\ 0 \\ -\frac{\rho_m \beta_T^2 q_T^2}{\alpha} \rho^n \end{pmatrix} e^{in\theta}.
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

Es fácil ver que en esta base, al imponer las condiciones de empalme (4.14), los modos T1 se desacoplan de los modos L y T2, obteniéndose tanto en el “core” como en el “shell” un modo desacoplado T1 y unos modos acoplados L-T2.

Modos en el core

- Modo Transversal desacoplado T1: La ecuación para determinar estos modos y las autofrecuencias están dadas por (4.37) y (4.38) respectivamente. Obsérvese que tiene la misma forma que para los modos T1 con $n = 0$ pero en este caso n puede tomar cualquier valor entero positivo. En la figura 4.5 se muestra la dependencia de la frecuencia con el radio del “core” para estos modos, en los casos $n = 1$ y $n = 2$.

$$J_n(\mu_n^{(m)}) = 0, \tag{4.37}$$

$$\omega^2 = \omega_{TO}^2 - (\mu_n^{(m)})^2 \frac{\beta_{Tc}^2}{a^2}. \quad (4.38)$$

En la figura 4.5 se muestran los modos con $n \neq 0$ y $k_z = 0$ desacoplados. Como se puede observar estos modos tienen un espectro similar a los modos transversales con $n = 0$ y $k_z = 0$.

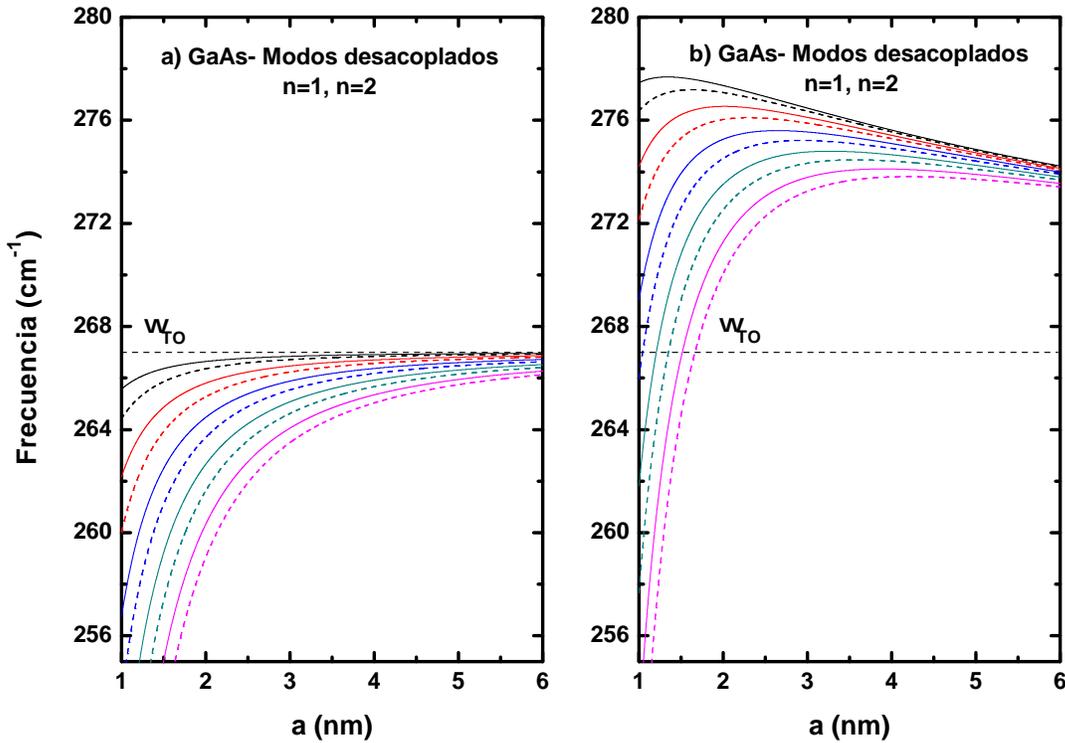


Figura 4.5: Modos desacoplados con $n = 1, n = 2$ y $k_z = 0$ en el “core” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función del radio del “core”. Los modos con $n = 1$ están representados por líneas continuas y los modos con $n = 2$ por líneas discontinuas. Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos representados en el panel b) se fijó $b - a = 3$ nm. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas.

•Modo Longitudinal-Transversal acoplado L-T2: Por su parte los modos acoplados L-T2 se determinan a partir de la ecuación (4.39)

$$\left[J'_n(t_c) - \frac{n}{t_c} J_n(t_c) \right] \left[J'_n(l_c) - C_1 \frac{n}{l_c} J_n(l_c) \right] - C_2 \left[1 - \frac{\omega^2}{\omega_{TO}^2} \right] \left[J'_n(t_c) J'_n(l_c) - \frac{n^2}{t_c l_c} J_n(t_c) J_n(l_c) \right] = 0. \quad (4.39)$$

donde

$$C_1 = \frac{\epsilon_{\infty}^{(s)} [(\epsilon_{\infty}^{(D)} - \epsilon_{\infty}^{(s)}) + \gamma^{2n} (\epsilon_{\infty}^{(D)} + \epsilon_{\infty}^{(s)})]}{\epsilon_{\infty}^{(c)} [(\epsilon_{\infty}^{(D)} - \epsilon_{\infty}^{(s)}) - \gamma^{2n} (\epsilon_{\infty}^{(D)} + \epsilon_{\infty}^{(s)})]}, \quad (4.40)$$

$$C_2 = \frac{[(\epsilon_{\infty}^{(s)} - \epsilon_{\infty}^{(c)}) (\epsilon_{\infty}^{(D)} - \epsilon_{\infty}^{(s)}) + \gamma^{2n} (\epsilon_{\infty}^{(c)} + \epsilon_{\infty}^{(s)}) (\epsilon_{\infty}^{(D)} + \epsilon_{\infty}^{(s)})]}{(\epsilon_0^{(c)} - \epsilon_{\infty}^{(c)}) [(\epsilon_{\infty}^{(D)} - \epsilon_{\infty}^{(s)}) - \gamma^{2n} (\epsilon_{\infty}^{(D)} + \epsilon_{\infty}^{(s)})]}.$$

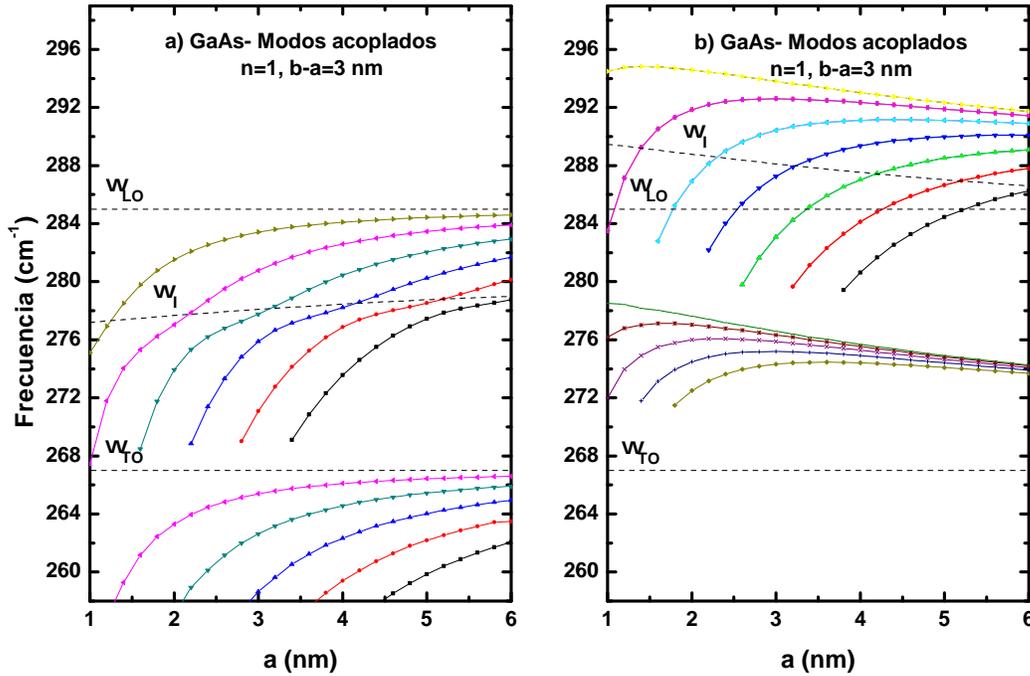


Figura 4.6: Modos acoplados con $n = 1$ y $k_z = 0$ en el “core” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función del radio del “core”. Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos se fijaron $b - a = 3$ nm y $\epsilon_{\infty}^{(D)} = 2.56$. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas. El fonón de intercara con $n = 1$ determinado a partir del modelo dieléctrico es representado por una línea discontinua.

La figura 4.6 muestra los modos acoplados en el “core” con $n = 1$ y $k_z = 0$, como función del radio del “core”, manteniendo el espesor del “shell” fijo, $b - a = 3$ nm. En la figura 4.6a no se considera

el efecto de los esfuerzos y en la figura 4.6b se considera el efecto de los esfuerzos. La frecuencia del fonón de intercara, determinado a partir de la aplicación del modelo dieléctrico, se representa por una línea discontinua. El modo de intercara se manifiesta a partir del cambio brusco en la monotonía de las curvas, ver figura 4.6a, en esta región predomina el carácter eléctrico de los modos. Como ya se ha visto para los modos desacoplados el efecto de los esfuerzos hace que aumente el valor de la frecuencia de los modos. Como el efecto de los esfuerzos es mayor que el del confinamiento, los modos de intercara no se hacen perceptibles en el espectro, figura 4.6b. Con el aumento del radio del “core” la frecuencia de los modos tiende a las del volumen. Estas curvas se determinan a partir de la ecuación (4.39).

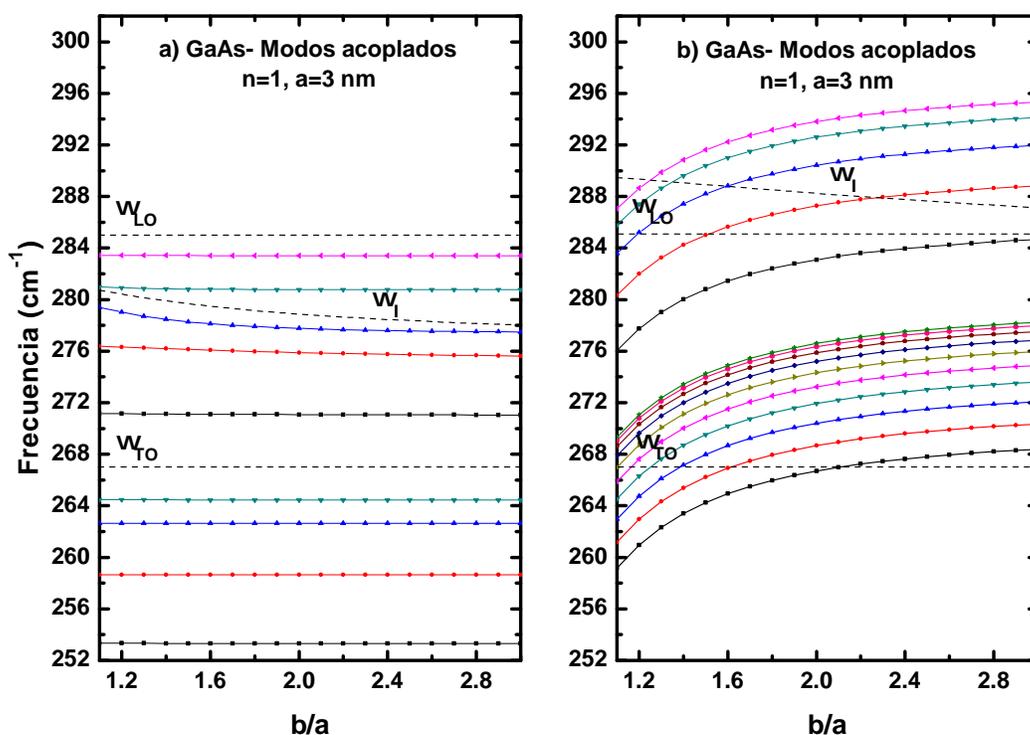


Figura 4.7: Modos acoplados con $n = 1$ y $k_z = 0$ en el “core” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función de la razón b/a . Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos se fijaron $a = 3$ nm y $\epsilon_\infty^{(D)} = 2.56$. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas. El fonón de intercara con $n = 1$ determinado a partir del modelo dieléctrico es representado por una línea discontinua.

La figura 4.7 muestra los modos acoplados en el “core” con $n = 1$ y $k_z = 0$, como función de la razón b/a , manteniendo el radio del “core” fijo, $a = 3$ nm. Se observa una dependencia muy débil con γ cuando no se considera el efecto de los esfuerzos, figura 4.7a. El tercer modo presenta una curvatura pronunciada cuando $\gamma \rightarrow 1$. Esto se debe a la fuerte interacción del potencial electrostático con el fonón de superficie en esta región. Cuando se incluye el efecto del esfuerzo, figura 4.7b, la dependencia de las frecuencias con γ es prácticamente la misma que se obtiene para el corrimiento de las frecuencias del volumen, ver figura 4.2. Estas aumentan con la razón, tendiendo a $\omega_{TO}(\gamma \rightarrow \infty) = 279.54 \text{ cm}^{-1}$ y $\omega_{LO}(\gamma \rightarrow \infty) = 296.70 \text{ cm}^{-1}$.

Modos en el shell

- Modo Transversal desacoplado T1: La ecuación para determinar los modos transversales desacoplados T1 en el shell y las autofrecuencias están dadas por (4.41) y (4.42). Al igual que en el “core” estas ecuaciones tienen la misma forma que para los modos T1 con $n = 0$, con la única particularidad de que en este caso n puede tomar cualquier valor entero positivo.

$$J_n(t_s)N_n(\gamma t_s) - J_n(\gamma t_s)N_n(t_s) = 0, \quad (4.41)$$

$$\omega^2(\gamma) = \omega_{TO}^2 - (\mu_n^{(m)}(\gamma))^2 \frac{\beta_{Ts}^2}{a^2}, \quad (4.42)$$

donde m numera los modos y $\mu_n^{(m)}(\gamma)$ son las soluciones de (4.41).

En la figura 4.8 se muestra la dependencia de la frecuencia con la razón b/a para estos modos, en los casos $n = 1$ y $n = 2$. Estos modos tienen un espectro similar a los modos transversales con $n = 0$ y $k_z = 0$.

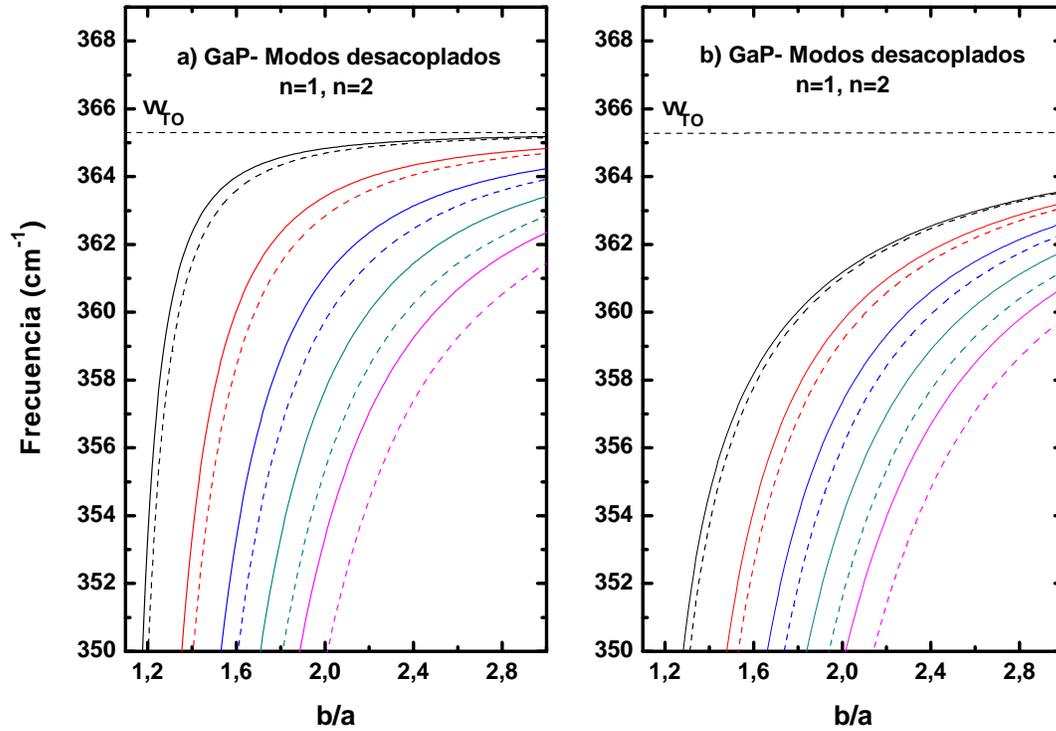


Figura 4.8: Modos desacoplados con $n = 1$, $n = 2$ y $k_z = 0$ en el “shell” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función de la razón b/a . Los modos con $n = 1$ están representados por líneas continuas y los modos con $n = 2$ por líneas discontinuas. Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos representados en el panel b) se fijó $a = 3$ nm. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas.

•Modo Longitudinal-Transversal acoplado L-T2: A partir de (4.17) se tiene que los modos acoplados L-T2 en el “shell” se obtienen de la ecuación secular (4.43)

$$\begin{pmatrix} \frac{n}{t_s} J_n(t_s) & \frac{n}{t_s} N_n(t_s) & J'_n(l_s) & N'_n(l_s) & 1 & -1 \\ J'_n(t_s) & N'_n(t_s) & \frac{n}{l_s} J_n(l_s) & \frac{n}{l_s} N_n(l_s) & 1 & 1 \\ \frac{n}{\gamma t_s} J_n(\gamma t_s) & \frac{in}{\gamma t_s} N_n(\gamma t_s) & J'_n(\gamma l_s) & N'_n(\gamma l_s) & \gamma^{n-1} & -\gamma^{-(n+1)} \\ J'_n(\gamma t_s) & N'_n(\gamma t_s) & \frac{in}{\gamma l_s} J_n(\gamma l_s) & \frac{n}{\gamma l_s} N_n(\gamma l_s) & \gamma^{n-1} & \gamma^{-(n+1)} \\ 0 & 0 & S_{53}(l_s) & S_{54}(l_s) & S_{55}(t_s) & S_{56}(t_s) \\ 0 & 0 & S_{63}(l_s) & S_{64}(l_s) & S_{65}(t_s) & S_{66}(t_s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{T2}^{(s)} \\ B_{T2}^{(s)} \\ A_L^{(s)} \\ B_L^{(s)} \\ A_H^{(s)} \\ B_H^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.43)$$

donde

$$\begin{aligned} S_{53}(l_s) &= J'_n(l_s) - \frac{\epsilon_\infty^{(c)} n}{\epsilon_\infty^{(s)} l_s} J_n(l_s), S_{54}(l_s) = N'_n(l_s) - \frac{\epsilon_\infty^{(c)} n}{\epsilon_\infty^{(s)} l_s} N_n(l_s), \\ S_{63}(l_s) &= J'_n(\gamma l_s) + \frac{\epsilon_\infty^{(D)} n}{\epsilon_\infty^{(s)} \gamma l_s} J_n(\gamma l_s), S_{64}(l_s) = N'_n(\gamma l_s) + \frac{\epsilon_\infty^{(D)} n}{\epsilon_\infty^{(s)} \gamma l_s} N_n(\gamma l_s), \\ S_{55}(t_s) &= -\frac{(\epsilon_\infty^{(s)} - \epsilon_\infty^{(c)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2}, S_{56}(t_s) = -\frac{(\epsilon_\infty^{(s)} + \epsilon_\infty^{(c)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2}, \\ S_{65}(t_s) &= -\frac{(\epsilon_\infty^{(D)} + \epsilon_\infty^{(s)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} \gamma^{n-1}, S_{66}(t_s) = -\frac{(\epsilon_\infty^{(s)} - \epsilon_\infty^{(D)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} \gamma^{-(n+1)}. \end{aligned}$$

La figura 4.9 muestra los modos acoplados en el “shell” con $n = 1$ y $k_z = 0$ como función de γ , manteniendo el radio del “core” fijo $a = 3$ nm. Estos modos se determinan a partir de la ecuación (4.43). En la figura 4.9a se muestran los modos sin considerar el efecto de los esfuerzos y en la figura 4.9b considerándolos. En ambos casos se observan claramente los dos modos fonónicos de intercara. Los fonones de intercara determinados a partir del modelo dieléctrico se representan con líneas discontinuas, obsérvese que se superponen a los predichos por el modelo fenomenológico continuo que hemos usado. En esta región el acoplamiento entre los modos LO y TO es fuerte. El efecto de los esfuerzos provoca una disminución en el valor de la frecuencia de los modos, ver figura 4.9b. Con el incremento de γ la frecuencia de los modos tiende a la frecuencia del volumen.

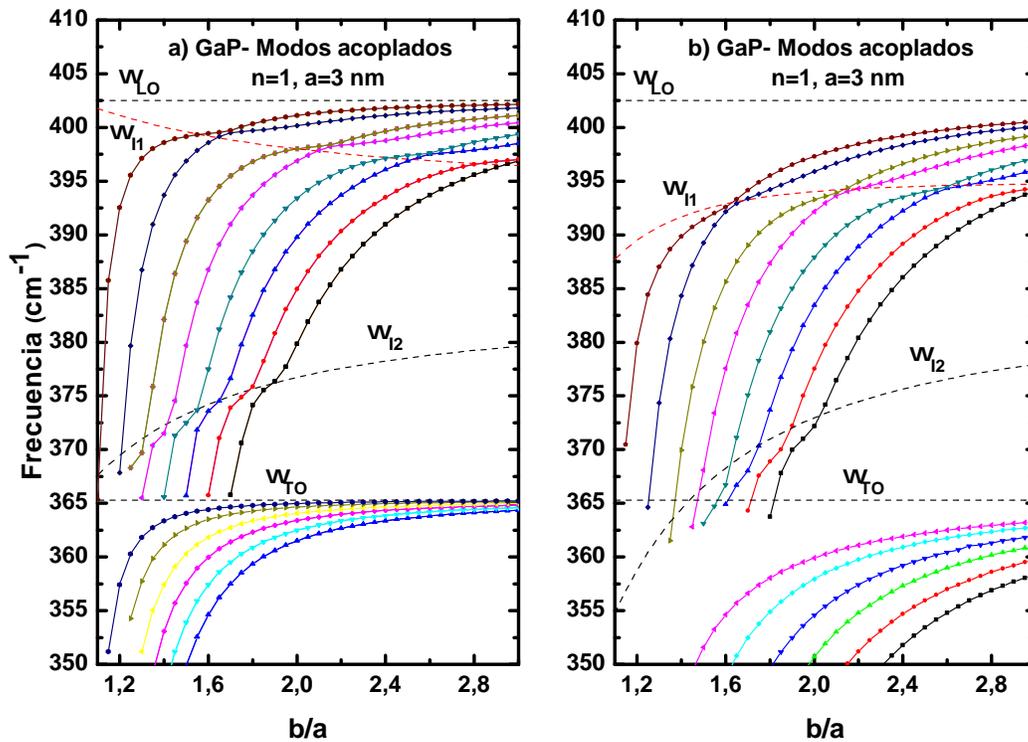


Figura 4.9: Modos acoplados con $n = 1$ y $k_z = 0$ en el “shell” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función de la razón b/a . Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos se fijaron $a = 3$ nm y $\epsilon_\infty^{(D)} = 2,56$. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas. Los fonones de intercara con $n = 1$ determinados a partir del modelo dieléctrico se representan por líneas discontinuas.

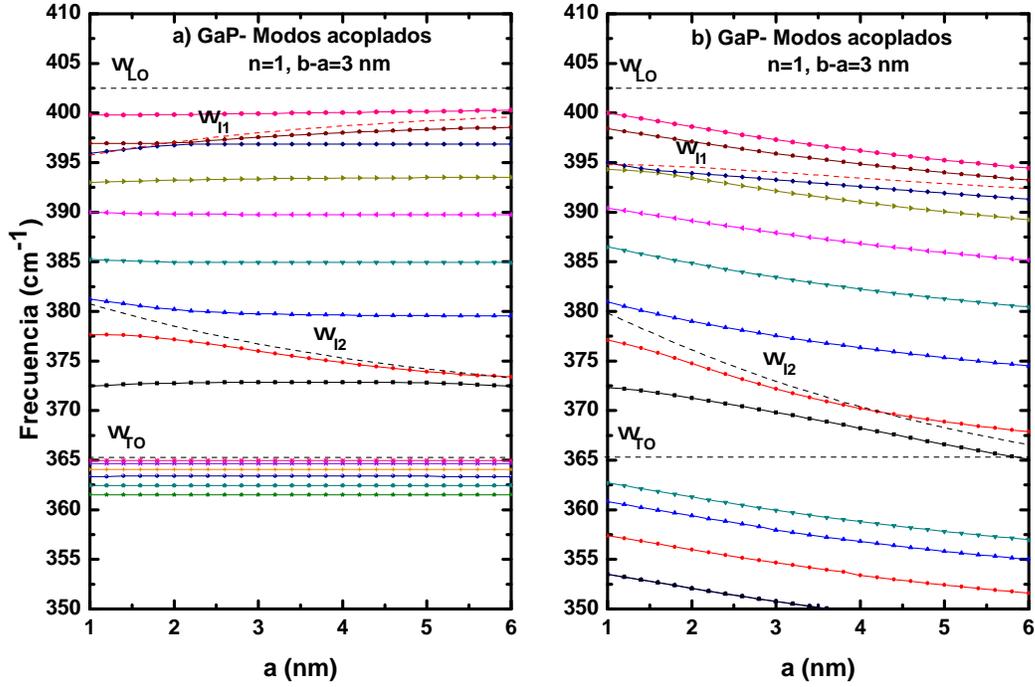


Figura 4.10: Modos acoplados con $n = 1$ y $k_z = 0$ en el “shell” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función del radio del “core”. Panel a) sin considerar el efecto de los esfuerzos, panel b) considerando el efecto de los esfuerzos. En los cálculos se fijaron $b - a = 3$ nm y $\epsilon_{\infty}^{(D)} = 2,56$. Las frecuencias longitudinal y transversal ópticas del volumen se representan por líneas discontinuas. Los fonones de intercara con $n = 1$ determinados a partir del modelo dieléctrico se representan por líneas discontinuas.

La figura 4.10 muestra los modos acoplados en el “shell” con $n = 1$ y $k_z = 0$ como función del radio del “core”, manteniendo el espesor del “shell” fijo $b - a = 3$ nm. Como muestra la figura, en general la dependencia de estos modos con el radio del “core” es muy débil. El segundo y tercer modo y el séptimo y octavo modo sí varían con el radio del “core”. Esto se debe a que en esta región predomina el carácter eléctrico de los modos. Obsérvese que estos modos coinciden con los fonones de intercara calculados por el modelo dieléctrico, los cuales se representan por líneas discontinuas. El efecto de los esfuerzos se manifiesta en una disminución en el valor de la frecuencia de los modos, ver figura 4.10b, la cual aumenta con el radio del “core”. En el límite $\gamma \rightarrow 1$ la frecuencia de los modos transversales tiende a $\omega_{TO}(\gamma \rightarrow 1) = 349.54$ cm^{-1} y la frecuencia de los modos longitudinales tiende a $\omega_{LO}(\gamma \rightarrow 1) = 387.37$ cm^{-1} .

4.4.3. Modos con $n = 0$ y $k_z \neq 0$

En el caso de los modos con $n = 0$ las funciones base, toman la forma

$$\begin{aligned}
 F_{T1} &= \begin{pmatrix} \frac{ik_z}{q_T} f'_0(q_T \rho) \\ 0 \\ f_0(q_T \rho) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_z z} \\
 F_{T2} &= \begin{pmatrix} 0 \\ -f'_0(q_T \rho) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_z z} \\
 F_L &= \begin{pmatrix} f'_0(q_L \rho) \\ 0 \\ \frac{ik_z}{q_L} f_0(q_L \rho) \\ \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} \frac{1}{q_L} f_0(q_L \rho) \end{pmatrix} e^{ik_z z} \\
 F_H &= \begin{pmatrix} g'_0(k_z \rho) \\ 0 \\ g_0(k_z \rho) \\ -\frac{\rho_m \beta_T^2 q_T^2}{\alpha} \frac{1}{k_z} g_0(k_z \rho) \end{pmatrix} e^{ik_z z}.
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

En este caso el modo T2 se desacopla de los modos L-T1.

Modos en el core

•Modo Transversal T2

Los modos con $n = 0$ desacoplados en el “core” se obtienen a partir de la ecuación (4.45), de donde se determina que la frecuencia de estos modos está dada por la expresión (4.46)

$$J_1(\mu_1^{(m)}) = 0, \tag{4.45}$$

$$\omega^2 = \omega_{TO}^2 - (\mu_1^{(m)})^2 \left(\frac{\beta_{Tc}}{a} \right)^2 - \beta_{Tc}^2 k_z^2, \tag{4.46}$$

donde $\mu_1^{(m)}$ representa las soluciones de la ecuación (4.45) numeradas por m .

Esta relación de dispersión es la misma que la relación de dispersión del volumen, salvo un corrimiento dado por el término $(\mu_1^{(m)})^2 \left(\frac{\beta_{Tc}}{a}\right)^2$.

•Modo Longitudinal-Transversal L-T1

$$\begin{pmatrix} \frac{k_a}{l_c} J_0'(t_c) & J_0'(l_c) & I_0'(k_a) & 0 & 0 \\ -J_0(t_c) & \frac{k_a}{l_c} J_0(l_c) & I_0(k_a) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_a}{l_c} J_0(l_c) & -\frac{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{\omega_{TO}^2} I_0(k_a) & \epsilon_\infty^{(c)} I_0(k_a) & \epsilon_\infty^{(c)} K_0(k_a) \\ 0 & J_0'(l_c) & -\frac{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{\omega_{TO}^2} I_0'(k_a) & \epsilon_\infty^{(s)} I_0'(k_a) & \epsilon_\infty^{(s)} K_0'(k_a) \\ 0 & 0 & 0 & C_{54} & C_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{T1}^{(c)} \\ A_L^{(c)} \\ A_H^{(s)} \\ A_H^{(s)} \\ B_H^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

donde

$$\begin{aligned} C_{54} &= \epsilon_\infty^{(D)} I_0(\gamma k_a) K_0'(\gamma k_a) - \epsilon_\infty^{(s)} I_0'(\gamma k_a) K_0(\gamma k_a), \\ C_{55} &= (\epsilon_\infty^{(D)} - \epsilon_\infty^{(s)}) K_0(\gamma k_a) K_0'(\gamma k_a). \end{aligned} \quad (4.48)$$

En la figura 4.11a se muestran las relaciones de dispersión de los modos en el “core” con $n = 0$ acoplados, el gráfico muestra la dependencia de la frecuencia contra $k_z a / \pi$, se tomaron valores de k_z en el rango del primer 20 % de la primera zona de Brillouin del volumen. Estas relaciones de dispersión se obtienen a partir de la ecuación (4.47). Además en la figura 4.11b se muestran las relaciones de dispersión de los modos con $n = 1$. Estas últimas se obtienen directamente de la ecuación general de los modos en el “core” (4.15).

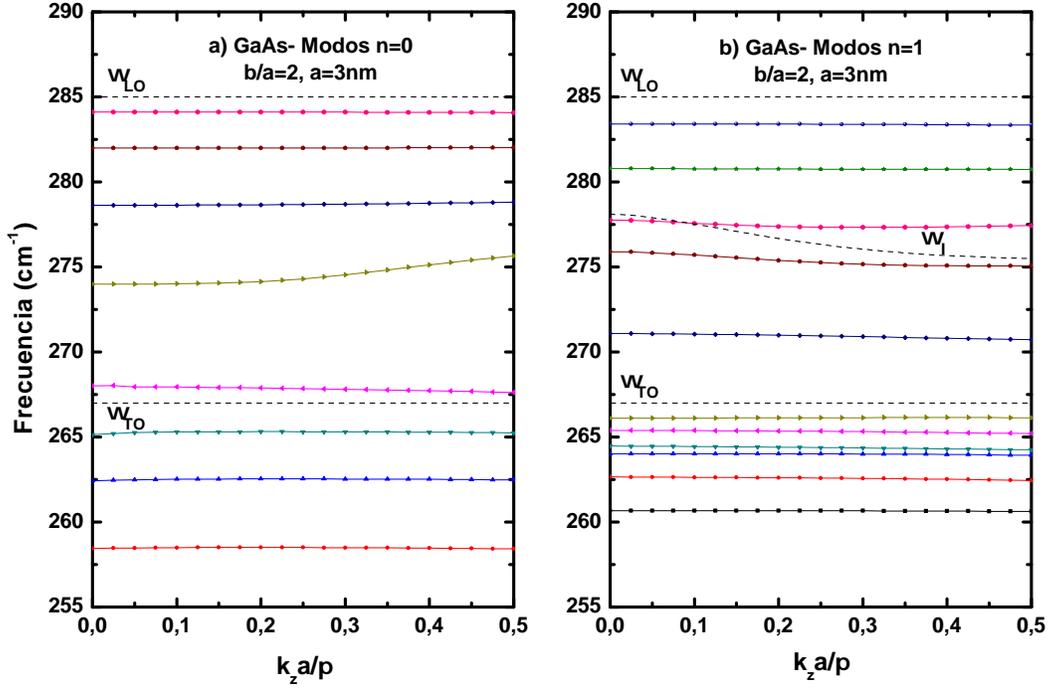


Figura 4.11: Modos en el “core” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función del vector de onda k_z . Panel a) modos acoplados con $n = 0$, panel b) modos con $n = 1$. Las frecuencias LO y TO del volumen y la frecuencia del fonón de intercara con $n = 1$ se representan por líneas discontinuas. En los cálculos se fijaron $a = 3$ nm y $b/a = 2$.

Modos en el shell

- Modo Transversal T2

$$J_1(\mu_1^{(m)})N_1(\gamma\mu_1^{(m)}) - J_1(\gamma\mu_1^{(m)})N_1(\mu_1^{(m)}) = 0, \quad (4.49)$$

$$\omega^2(\gamma) = \omega_{TO}^2 - (\mu_1^{(m)}(\gamma))^2 \frac{\beta_{Ts}^2}{a^2} - \beta_{Ts}^2 k_z^2, \quad (4.50)$$

donde $\mu_1^{(m)}$ representa las soluciones de la ecuación (4.49) para un γ dado.

- Modo Longitudinal-Transversal L-T1

$$\begin{pmatrix} \frac{k_a}{t_s} J'_0(t_s) & \frac{k_a}{t_s} N'_0(t_s) & J'_0(l_s) & N'_0(l_s) & I'_0(k_a) & K'_0(k_a) \\ -J_0(t_s) & -N_0(t_s) & \frac{k_a}{l_s} J_0(l_s) & \frac{k_a}{l_s} N_0(l_s) & I_0(k_a) & K_0(k_a) \\ \frac{k_a}{t_s} J'_0(\gamma t_s) & \frac{k_a}{t_s} N'_0(\gamma t_s) & J'_0(\gamma l_s) & N'_0(\gamma l_s) & I'_0(\gamma k_a) & K'_0(\gamma k_a) \\ -J_0(\gamma t_s) & -N_0(\gamma t_s) & \frac{k_a}{l_s} J_0(\gamma l_s) & \frac{k_a}{l_s} N_0(\gamma l_s) & I_0(\gamma k_a) & K_0(\gamma k_a) \\ 0 & 0 & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ 0 & 0 & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{T1}^{(s)} \\ B_{T1}^{(s)} \\ A_L^{(s)} \\ B_L^{(s)} \\ A_H^{(s)} \\ B_H^{(s)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.51)$$

donde

$$\begin{aligned} C_{53} &= J'_0(l_s) I_0(k_a) - \frac{\epsilon_\infty^{(c)} k_a}{\epsilon_\infty^{(s)} l_s} J_0(l_s) I'_0(k_a), \\ C_{54} &= N'_0(l_s) I_0(k_a) - \frac{\epsilon_\infty^{(c)} k_a}{\epsilon_\infty^{(s)} l_s} N_0(l_s) I'_0(k_a), \\ C_{55} &= \frac{(\epsilon_\infty^{(c)} - \epsilon_\infty^{(s)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} I_0(k_a) I'_0(k_a), \\ C_{56} &= \frac{(\omega_{TOS}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} (\epsilon_\infty^{(c)} I'_0(k_a) K_0(k_a) - \epsilon_\infty^{(s)} I_0(k_a) K'_0(k_a)), \\ C_{63} &= J'_0(l_s) K_0(k_a) - \frac{\epsilon_\infty^{(D)} k_a}{\epsilon_\infty^{(s)} l_s} J_0(l_s) K'_0(k_a), \\ C_{64} &= N'_0(l_s) K_0(k_a) - \frac{\epsilon_\infty^{(D)} k_a}{\epsilon_\infty^{(s)} l_s} N_0(l_s) K'_0(k_a), \\ C_{65} &= \frac{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} (\epsilon_\infty^{(D)} K'_0(\gamma k_a) I_0(\gamma k_a) - \epsilon_\infty^{(s)} K_0(\gamma k_a) I'_0(\gamma k_a)), \\ C_{66} &= \frac{(\epsilon_\infty^{(D)} - \epsilon_\infty^{(s)}) (\omega_{TO}^2 - \omega^2)}{(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_\infty^{(s)}) \omega_{TO}^2} K_0(\gamma k_a) K'_0(\gamma k_a). \end{aligned} \quad (4.52)$$

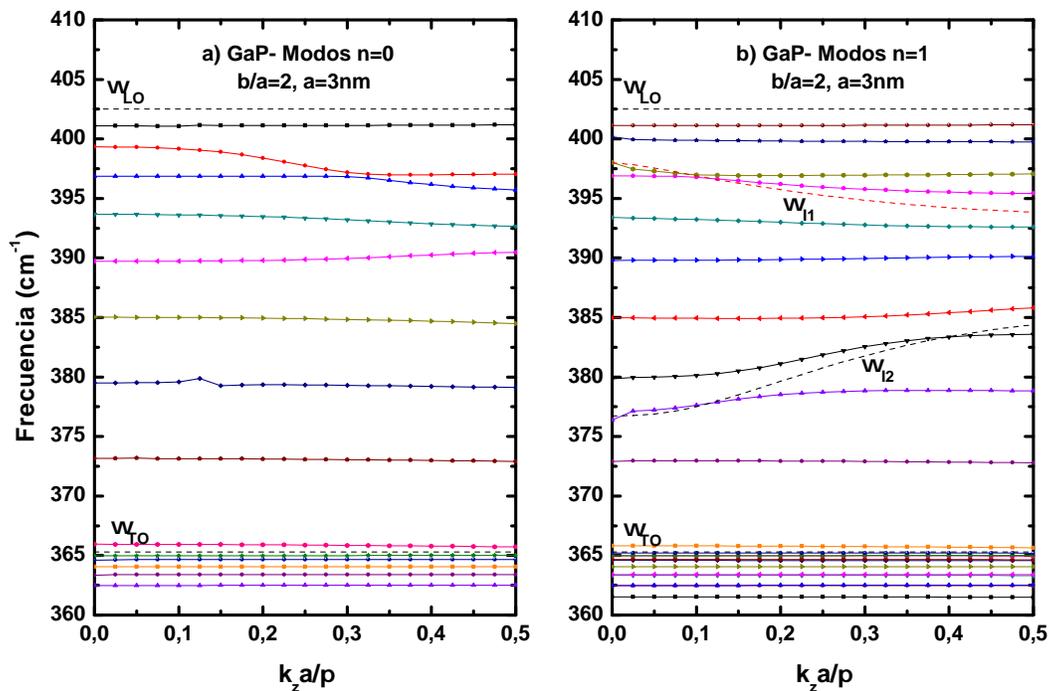


Figura 4.12: Modos en el “shell” de un nanohilo core/shell GaAs-GaP en función del vector de onda k_z . Panel a) modos acoplados con $n = 0$, panel b) modos con $n = 1$. Las frecuencias LO y TO del volumen y las frecuencias de los fonones de intercara con $n = 1$ se representan por líneas discontinuas. En los cálculos se fijaron $a = 3 \text{ nm}$ y $b/a = 2$.

Conclusiones

Se han estudiado los modos vibracionales en materiales con estructura diamante, zinc blenda y wurtzita, en el volumen y en nanohilos cilíndricos revestidos. Para estudiar las oscilaciones de la red en el volumen, se usó un modelo de constantes de fuerza considerando la aproximación de interacción hasta terceros vecinos. Por medio de este modelo:

- Se obtuvieron las ecuaciones de movimiento en las direcciones de alta simetría de estas estructuras, las cuales conducen a modos longitudinales y transversales desacoplados, estableciéndose relaciones de equivalencia entre las constantes de fuerza del problema tridimensional de las oscilaciones de la red y las constantes de fuerza de las cadenas lineales equivalentes.
- Se obtuvieron expresiones analíticas para las relaciones de dispersión en cualquier dirección de la red recíproca y se reportaron los valores de las constantes de fuerza que están involucradas en ellas, para materiales del grupo IV (C, Si, Ge y Sn) con estructura diamante y los nitruros del grupo III (BN, AlN, GaN e InN) con estructuras zinc blenda y wurtzita. A partir de estas expresiones obtenidas se pueden obtener de forma directa otras magnitudes físicas, como son; las velocidades del sonido, la parabolicidad de las ramas ópticas y las constantes de elasticidad.
- Se reportan las relaciones de dispersión en las principales direcciones de alta simetría, utilizando en el ajuste, además de las masas de los átomos, solamente las frecuencias en el centro y borde de la primera zona de Brillouin. Las relaciones de dispersión determinadas en los materiales con estructura zinc blenda y wurtzita muestran mejor concordancia con los datos experimentales y *ab initio* que las relaciones de dispersión determinadas en materiales con estructura diamante. Esto último está determinado en parte en el hecho de que el modelo de constantes de fuerza funciona mejor en estructuras con enlace parcialmente iónico como la zinc blenda y la wurtzita que en estructuras con enlace covalente como es el caso de la diamante. Otro aspecto que es importante resaltar con relación al ajuste de las relaciones de dispersión en las estructuras zinc blenda y wurtzita es que a pesar de ser un modelo relativamente simple con un costo computacional muy bajo, la concordancia está en el orden de la discrepancia que tienen los cálculos *ab initio* y experimentales reportados en la literatura.

Por su parte para el estudio de las oscilaciones en los nanohilos cilíndricos revestidos se utilizó un modelo fenomenológico continuo de onda larga. Por medio de este modelo:

- Se determinó tanto en el “core” como en el “shell” el acoplamiento de los modos, mostrándose que; los modos con $n \neq 0$ y $k_z \neq 0$ están completamente acoplados, los modos con $n \neq 0$ y $k_z = 0$ así como los modos con $n = 0$ y $k_z \neq 0$ están compuestos por un modo transversal desacoplado y un modo transversal acoplado con un modo longitudinal. Por su parte los modos con simetría cilíndrica ($n = 0$) y $k_z = 0$ están totalmente desacoplados.

- Se determinó la dependencia de la frecuencia de los modos con el vector de onda k_z y parámetros geométricos del sistema, como son, el radio del “core” y el espesor del “shell”. Se muestra que los modos desacoplados del “core”, no dependen del espesor del “shell” y los modos desacoplados en el “shell”, no dependen del radio del “core”. En el caso de los modos acoplados se mantiene esta dependencia, a excepción de los modos en la región de los modos de intercara. Se observa claramente el acoplamiento entre los modos confinados y los modos de intercara. Estos últimos muestran muy buena concordancia con los modos de intercara determinados a partir del modelo dieléctrico. Esta relación entre la frecuencia de los modos y la geometría y dimensiones del sistema es muy importante, ya que permite determinar parámetros geométricos de dimensión y forma a partir del espectro de frecuencias.

- Otro aspecto que se consideró fue el efecto de los esfuerzos, que surgen en estas nanoestructuras producto de la forma del sistema y de la diferencia de constantes de la red entre los materiales constituyentes del “core” y el “shell”, sobre los modos vibracionales. En la pareja de materiales considerada (GaAs-GaP), dada la relación de las constantes de la red de los mismos, se observa un incremento de la frecuencia de los modos en el “core” y un decrecimiento de la frecuencia de los modos en el “shell”. Cuando aumenta el radio del “core” las frecuencias de los modos tienden a las frecuencias del volumen y se pierde el desdoblamiento entre los modos transversales, como era de esperar. Otro tanto ocurre en el “shell” cuando aumenta su espesor. Por su parte los efectos del confinamiento son perceptibles cuando el radio del “core” o el espesor del “shell” son del orden de los 3 – 4 nm, en uno y otro caso.

Bibliografía

- [1] M. Born and K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices*, Clarendon Press: Oxford (1954).
- [2] A. Tabata, R. Enderlein, J. R. Leite, S. W. da Silva, J. C. Glazerani, D. Schiroka, M. Kloidt, and K. Lischka, “Comparative Raman studies of cubic and hexagonal GaN epitaxial layers”, *J. Appl. Phys.* **79**, 4137 (1996).
- [3] L. Filippidis, H. Siegle, A. Hoffmann, C. Thomsen, K. Karch, and F. Bechstedt, “Raman Frequencies and Angular Dispersion of Polar Modes in Aluminum Nitride and Gallium Nitride”, *phys. stat. sol. (b)* **198**, 621 (1996).
- [4] A. Cros, R. Dimitrov, H. Ambacher, M. Stutzmann, S. Christiansen, M. Albrecht, and H. P. Strunk, “Influence of magnesium doping on the structural properties of GaN layers”, *J. Cryst. Growth* **181**, 197 (1997).
- [5] H. Siegle, G. Kaczmarczyk, L. Filippidis, A. P. Litvinchuk, A. Hoffmann, and C. Thomsen, “Zone-boundary phonons in hexagonal and cubic GaN ”, *Phys. Rev. B* **55**, 7000 (1997).
- [6] V. Yu. Davydov, Yu. E. Kitaev, I. N. Goncharuk, A. N. Smirnov, J. Graul, O. Semchinova, D. Uffmann, M. B. Smirnov, A. P. Mirgorodsky, and R. A. Evarestov, “Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN ”, *Phys. Rev. B* **58**, 12 899 (1998).
- [7] U. Haboek, H. Siegle, A. Hoffmann, and C. Thomsen, “Lattice dynamics in GaN and AlN probed with first and second order Raman spectroscopy”, *phys. stat. sol. (c)* **0**, 1710 (2003).
- [8] J. Zi, X. Wan, G. Wei, K. Zhan, and X. Xie, “Lattice dynamics of zinc-blende GaN and AlN: II. Superlattice phonons”, *J. Phys: Condens Matter* **8**, 6329 (1996).
- [9] H. M. Tutuncu and G. P. Srivastava, “Phonons in zinc-blende and wurtzite phase of GaN, AlN and BN with the adiabatic bond-charge model”, *Phys. Rev. B* **62**, 5028 (2000-II).

- [10] I. Gorczyca, N. E. Christensen, E. L. Peltzer y Blancá, and C. O. Rodriguez, “Optical phonon modes in GaN and AlN”, *Phys. Rev. B* **51**, 11936 (1995).
- [11] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall, “Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN”, *Phys. Rev. B* **53**, 16310 (1996).
- [12] K. Karch and F. Behstedt, “*Ab initio* lattice dynamics of BN and AlN: Covalent versus ionic forces”, *Phys. Rev. B* **56**, 7404 (1997-II).
- [13] K. Karch, J. M. Wagner, and F. Behstedt, “*Ab initio* study of structural, dielectric, and dynamical properties of GaN”, *Phys. Rev. B* **57**, 7043 (1998).
- [14] A. Fasolino, E. Molinari, and K. Kunc, “Planar force-constant method for lattice dynamics of structures”, *Phys. Rev. B* **41**, 8302 (1990).
- [15] A. S. Barker, Jr., J. L. Merz, and A.C. Gossard, “Study of zone-folding effects on phonons in alternating monolayers of GaAs-AlAs”, *Phys. Rev. B* **17**, 3181 (1978).
- [16] C. Colvard, T. A. Gant, M. V. Klein, R. Merlin, R. Fischer, H. Morkoc, and A. C. Gossard, “*Folded* acoustic and quantized optic phonons in (GaAl)As superlattices”, *Phys. Rev. B* **31**, 2080 (1985).
- [17] B. Jusserand, D. Paquet, and A. Regreny, “*Folded* optical phonons in GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs superlattices”, *Phys. Rev. B* **30**, 6245 (1984).
- [18] P. Molinas Mata, and M. Cardona, “Planar force-constant models and internal strain parameter of Ge and Si”, *Phys. Rev. B* **43**, 9799 (1991).
- [19] Harvey Kaplan and John J. Sullivan, “Lattice vibrations of zinc-blende structure crystals”, *Phys. Rev.* **130**, 120 (1963).
- [20] J. F. Vetelino and S. S. Mitra, “Lattice dynamics of SiC”, *Phys. Rev.* **178**, 1349 (1969).
- [21] R. Banerjee and Y. P. Varshni, “Lattice dynamics of III-V compounds”, *Can. Journal of Physics.* **47**, 451 (1969).
- [22] Y. Huang, X. Duan, Y. Cui, L. Lauhon, K. Kim, and C. Lieber, “Logic Gates and Computation from Assembled Nanowire Building Blocks”, *Science* **294**, 1313 (2001).
- [23] A. Maharjan, K. Pemasiri, P. Kumar, A. Wade, L. M. Smith, H. E. Jackson, J. M. Yarrison-Rice, A. Kogan, S. Paiman, Q. Gao, H. H. Tan, and C. Jagadish, “Room temperature photocurrent spectroscopy of single zincblende and wurtzite InP nanowires”, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 193115, (2009).

- [24] Ethan D. Minot, Freek Kelkensberg, Maarten van Kouwen, Jordan A. van Dam, Leo P. Kouwenhoven, Valery Zwiller, Magnus T. Borgström, Olaf Wunnicke, Marcel A. Verheijen, and Erik P. A. M. Bakkers, “Single Quantum Dot Nanowire LEDs”, *Nano Lett.* **7**, 367 (2007).
- [25] G. Zheng, F. Patolsky, Y. Cui, W. Wang, and C. Lieber, “Multiplexed electrical detection of cancer markers with nanowire sensor arrays”, *Nature Biotechnology* **23**, 1294 (2005).
- [26] Bin Hua, Junichi Motohisa, Yasunori Kobayashi, Shinjiroh Hara, and Takashi Fukui, “Single GaAs/GaAsP Coaxial Core/Shell Nanowire Lasers”, *Nano Letters* **9**, 112 (2009).
- [27] Y. M. Niquet, “Effects of a Shell on the Electronic Properties of Nanowire Superlattices”, *Nano Letters* **7**, 1105 (2007).
- [28] Hung-Min Lin, Yong-Lin Chen, Jian Yang, Yao-Chung Liu, Kai-Min Yin, Ji-Jung Kai, Fu-Rong Chen, Li-Chyong Chen, Yang-Fang Chen, and Chia-Chun Chen, “Synthesis and Characterization of Core-Shell GaP/GaN and GaN/GaP Nanowires”, *Nano Letters* **3**, 537 (2003).
- [29] Mohammad Montazeri, Melodie Fickenscher, Leigh M. Smith, Howard E. Jackson, Jan Yarrison-Rice, Jung Hyun Kang, Qiang Gao, H. Hoe Tan, Chennupati Jagadish, Yanan Guo, Jin Zou, Mats-Erik Pistol, and Craig E. Pryor, “Direct Measure of Strain and Electronic Structure in GaAs/GaP Core-Shell Nanowires” *Nano Letters* **10**, 880 (2005).
- [30] Li Zhang and Jun-jie Shi, “Polar interface optical phonon modes and Fröhlich electron-phonon interaction Hamiltonians in wurtzite quantum well wires”, *Semiconductor Science and Technology*, **20**, 592 (2005).
- [31] C. Trallero-Giner, F. García-Moliner, V. R. Velasco, and M. Cardona, “Analysis of the phenomenological models for long-wavelength polar optical modes in semiconductor layered systems”, *Phys. Rev. B* **45**, 11944 (1992).
- [32] C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, and F. García-Moliner, “Long Wave Polar Modes in Semiconductor Heterostructures”, Elsevier Science (1998).
- [33] R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner, V. R. Velasco, and C. Trallero-Giner, “Optical modes in GaAs-based quantum wells”, *Phys. Rev. B* **48**, 5672 (1993).
- [34] J. Nieto-Jalil and R. Pérez-Álvarez, “Optical Phonons in II-VI Quantum Wells”, *phys. stat. sol. (a)* **164**, 699 (1997).

- [35] R. Pérez-Álvarez, V. R. Velasco, and F. García-Moliner, “Polar optical modes in GaAs-AlAs superlattices”, *Physica Scripta* **51**, 256 (1995).
- [36] F. Comas, C. Trallero-Giner, and A. Cantarero, “Optical phonon and electron-phonon interaction in quantum wires”, *Phys. Rev. B* **47**, 7602 (1993-II).
- [37] L. Chico and R. Pérez-Álvarez, “Continuum model for long-wavelength optical phonons in cylinders: Application to carbon nanotubes”, *Phys. Rev. B* **69**, 035419 (2004).
- [38] E. Roca, C. Trallero-Giner, and M. Cardona, “Polar optical vibrational modes in quantum dots”, *Phys. Rev. B* **49**, 13704 (1994).
- [39] F. Comas and C. Trallero-Giner, “Polar optical oscillations of layered semiconductor structures in the long-wavelength limit”, *Physica B: Condensed Matter* **192**, 394, (1993).
- [40] G. F. Koster, *Solid State Physics V*. New York: Academic Press (1957).
- [41] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976).
- [42] S. A. Solin and A. K. Ramdas, “Raman Spectrum of Diamond”, *Phys. Rev. B* **1**, 1687 (1970).
- [43] G. Dolling, “Proc. Symp. Inelastic Scattering Neutrons in Solids and Liquids”, Chalk River, IAEA, Vienna, **2**, 37 (1963). R. Tubino, L. Piseri, and G. Zerbi, “Lattice Dynamics and Spectroscopic Properties by a valence Force Potencial of Diamondlike Crystals: C, Si, Ge and Sn”, *J. Chem. Phys.* **56**, 1022 (1972).
- [44] G. Nilsson and G. Nelin, “Study of the Homology between Silicon and Germanium by Thermal-Neutron Spectrometry”, *Phys. Rev. B* **6**, 3777 (1972).
- [45] Kerstin Hummer, Judith Harl, and Georg Kresse, “Heyd-Scuseria-Ernzerhof hybrid functional for calculating the lattice dynamics of semiconductors”, *Phys. Rev. B* **80**, 115205 (2009).
- [46] Frank Herman, “Lattice vibrational spectrum of germanium”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **8**, 405 (1959).
- [47] W. Weber, “Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and a-Sn”, *Phys. Rev. B* **15**, 4789 (1977).
- [48] D. L. Price, J. M. Rowe, and R. M. Nicklow, “Lattice Dynamics of Grey Tin and Indium Antimonide”, *Phys. Rev. B* **3**, 1268 (1971).

- [49] K. Parlinski and Y. Kawazoe, “*Ab initio* study of phonons in hexagonal GaN”, Phys. Rev. B **60**, 15511 (1999-I).
- [50] F. Bechstedt, O. Grossner, and J. Furthmüller, “Dynamics and polarization of group-III nitride lattice: A first-principles study”, Phys. Rev. B **62**, 8003 (2000-II).
- [51] G. Kern, G. Kresse and J. Hafner, “*Ab initio* calculation of the lattice dynamics and phase diagram of boron nitride”, Phys. Rev. B **59**, 8551 (1999-I).
- [52] Nobuko Ohba, Kasutoshi Miwa, Noyuki Nagazako, and Atsuo Fukumoto, “First-principles study on structural, dielectric, and dynamical properties for three BN polytypes”, Phys. Rev. B **63**, 115207 (2001).
- [53] G. Kaczmarczyk, A. Kaschner, S. Reich, A. Hoffmann, C. Thomsen, D. J. As, A. P. Lima, D. Schikora, K. Lischka, R. Averbeck, and H. Riechert, “Lattice dynamics of hexagonal and cubic InN: Raman-scattering experiments and calculations”, Appl. Phys. Lett. **76**, 2122 (2000).
- [54] C. Bungaro, K. Rapcewicz, and J. Bernholc, “*Ab initio* phonon dispersions of wurtzite AlN, GaN and InN”, Phys. Rev. B **61**, 6720 (2000-II).
- [55] T. Ruf, J. Serrano, M. Cardona, P. Pavone, M. Pabst, M. Krisch, M. Dastuto, T. Suski, J. Grzegory, and M. Leszczynski, “Phonon Dispersion Curves in Wurtzite -Structure GaN Determined by Inelastic X-Ray Scattering ”, Phys. Rev. Lett. **86**, 906 (2001).
- [56] V. Yu. Davydov, A. A. Klochikhin, M. B. Smirnov, V. V. Emtsev, V. D. Petrikov, I. A. Abroyan, A. I. Titov, I. N. Goncharuk, A. N. Smirnov, V. V. Mamutin, S. V. Ivanov and T. Inushima, “Phonon in Hexagonal InN. Experiment and Theory”, phys. stat. sol. (b) **216**, 779 (1999).
- [57] M. Schwoerer-Bohning, A. T. Macrander, M. Pabst, and P. Pavone, “Phonons in Wurtzite Aluminum Nitride”, phys, stat. sol. (b) **215**, 177 (1999).
- [58] B.K. Ridley “*Electrons and Phonons in Semiconductor Multilayers*”, Cambridge University Press, (1997).
- [59] M. A. Stroschio, M. Dutta, D. Kahn and K. W. Kim, “Continuum model of optical phonons in a nanotube”, Superlattices and Microstructures **29**, 405 (2001).
- [60] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill (1953).

- [61] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1972).
- [62] J. E. Spanier, R. D. Robinson, F. Zhang, S. W. Chan, and I. P. Herman, “Size-dependent properties of CeO_{2-y} nanoparticles as studied by Raman scattering”, *Phys.Rev. B* **64**, 245407 (2001).
- [63] Z. D. Dohcevic-Mitrovica, M. J. Scepanovica, M. U. Grujic-Brojcina, Z. V. Popovica, S. B. Boskovicb, B. M. Matovicb, M. V. Zinkevichc, and F. Aldinger, “The size and strain effects on the Raman spectra of Ce_{1-x}Nd_xO_{2-δ} (0=x=0.25) nanopowders”, *Solid State Commun* **137**, 387 (2006).
- [64] José Menéndez, Rachna Singh, and Jeff Drucker, “Theory of strain effects on the Raman spectrum of Si-Ge core-shell nanowires”, *Ann. Phys. (Berlin)* **523**, 145 (2011).
- [65] W. Martienssen and H. Warlimont (Eds.), *Springer Handbook of condensed Matter and Materials Data*, Springer Berlin, Heidelberg, New York (2005).
- [66] P. H. Borchers, K. Kunc, G. F. Alfrey, R. L. Hall, “The lattice dynamics of gallium phosphide”, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12** (1979).
- [67] Sadao Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, John Wiley and Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex PO19 8SQ, England (2005).
- [68] D. J. Lockwood, Guolin Yu, and N. L. Rowell, “Optical phonon frequencies and damping in AlAs, GaP, GaAs, InP, InAs and InSb studied by oblique incidence infrared spectroscopy”, *Solid State Communications* **136**, 404-409 (2005).
- [69] F. de León Pérez, and R. Pérez-Álvarez, “Optical phonons in mixed nonpolar-polar heterostructures”, *Phys. Rev. B* **62**, 9915 (2000-I).