

# ESTUDIO AB-INITIO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELÁSTICAS Y PIEZOELÉCTRICAS DEL COMPUESTO CdSe

## AB-INITIO STUDY OF STRUCTURAL, ELASTIC AND PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF CdSe COMPOUND

N. V. González Lemus<sup>†</sup> y E. A. Albanesi<sup>†‡</sup>

<sup>†</sup>INTEC-CONICET, GÜEMES 3450, 3000 SANTA FE, ARGENTINA,

<sup>‡</sup>FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD NACIONAL DE ENTRE RÍOS, 3101 ORO VERDE, ARGENTINA

e-mail: [vanessagonzalez@santafe-conicet.gov.ar](mailto:vanessagonzalez@santafe-conicet.gov.ar)

Recibido 30/03/2012; aprobado 10/09/2012

En el presente trabajo presentamos un estudio teórico de la estructura electrónica, propiedades ópticas, elásticas y piezoeléctricas del semiconductor con estructura wurtzita CdSe, obtenidas mediante cálculos ab-initio empleando el método de ondas planas y pseudopotenciales dentro de la teoría de la funcional densidad (DFT), utilizando la aproximación de gradiente generalizado (GGA). Los cálculos basados en DFT suelen despreciar el valor del gap de energía en muchos sistemas, para corregir este efecto se introdujo la corrección GW en el marco de la teoría de perturbación de muchos cuerpos, a partir de esto calculamos el módulo de bulk ajustando valores de energía y volumen mediante la implementación de la ecuación de Birch-Murnaghan, por último mediante las teorías de Voigt y Reuss, estimamos el módulo de elasticidad transversal, el módulo de Young, el coeficiente de Poisson y la corrección anisotrópica del módulo de Bulk.

Palabras Claves: CdSe, ab-initio, DFT, GW, Elasticidad.

In this paper we present a theoretical study of electronic structure, optical, elastic and piezoelectric properties of semiconductor with wurtzite structure CdSe, obtained by ab-initio calculations using the method of plane waves and pseudopotentials within the density functional theory (DFT) using the generalized gradient approximation (GGA). DFT calculations frequently disparage the value of the energy gap in many systems, to correct this, GW correction was introduced in the framework of perturbation theory of many bodies, from this we calculate the bulk modulus adjusted the energy and volume values through the implementation of the Birch-Murnaghan equation, finally by the theories of Voigt and Reuss, we estimate the elastic modulus, Young's modulus, Poisson's ratio and anisotropic correction of bulk module.

Key Word: CdSe, ab-initio, DFT, GW, Elasticity

### I. INTRODUCCIÓN

El seleniuro de cadmio (CdSe) es un compuesto semiconductor del grupo II-VI, con estructura wurtzita, grupo espacial  $P6_3mc$  Fig 1. Este compuesto ha cobrado gran interés en los últimos años debido a sus múltiples e importantes aplicaciones tales como los detectores de radiación nuclear que operan a temperatura ambiente, dispositivos ópticos no lineales, celdas solares, transistores, diodos emisores de luz, dispositivos electroluminiscentes, etc.

En la actualidad conocer la estructura electrónica de los materiales mediante cálculos a primeros principios o ab-initio, permite la comprensión de la naturaleza de los compuestos así como su comportamiento a escala cuántica y predecir su respuesta a escalas mayores, debido a que muchos de estos parámetros están relacionados con fenómenos ópticos, magnéticos, eléctricos, estructurales, etc.; por lo tanto, la teoría de elasticidad del medio continuo, puede ser abordada también cuánticamente, ya que desde el punto de vista microscópico, la elasticidad tiene su origen en las fuerzas intermoleculares.

Presentamos en este trabajo el cálculo ab-initio de la estructura electrónica para el CdSe, basado en la teoría de la funcional densidad (DFT)<sup>(1)</sup> con la aproximación GGA<sup>(2)</sup> para el cálculo del término de correlación e intercambio, a través del método de ondas planas y pseudopotenciales<sup>(3)</sup>, también presentamos un estudio de

las propiedades ópticas la función dieléctrica (parte real y compleja), índice de refracción, reflectividad, coeficiente de absorción y conductividad; e implementamos el cálculo perturbativo GW<sup>(4)</sup>, aplicado a la corrección de la estructura de bandas y obteniendo una corrección del valor del band gap.

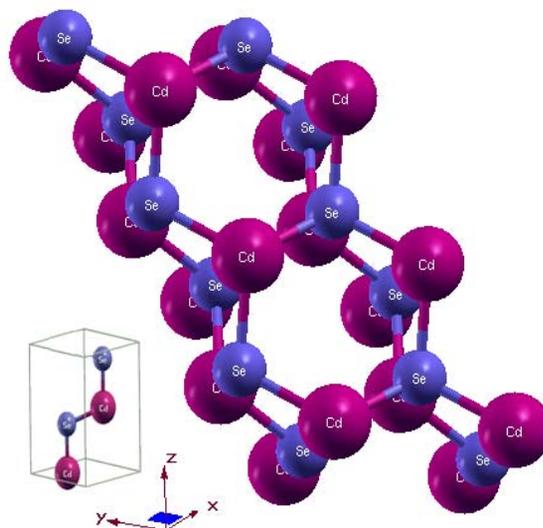


Figura 1. Vista superior del CdSe estructura wurtzita, parámetros de red  $a=4,302\text{Å}$   $c=7,021\text{Å}$ .

Finalmente mostramos el estudio de las propiedades elásticas como funciones de respuesta (RF) perturbativas y mediante las teorías de Voigt y Reuss y cálculo del modulo de bulk <sup>(5)</sup>, y su corrección anisotrópica.

## II. MÉTODO DE CÁLCULO

### Estructura electrónica y corrección GW

En el marco de la DFT<sup>(1)</sup>, utilizamos la aproximación de gradiente generalizado GGA <sup>(2)</sup> para el termino de intercambio y correlación y la aproximación del pseudopotencial <sup>(3)</sup>, incluida en el software ABINIT<sup>(6)</sup>, donde se toma en cuenta que los electrones de valencia determinan mayormente las propiedades químicas y físicas de los sistemas; debido a que el esquema general de cálculo de la DFT puede subvalorar el valor del gap de energía en muchos sistema, para corregir este efecto se utilizo la corrección GW desarrollada por Hedin en el marco de la teoría de perturbación de muchos cuerpos en la que se aproxima el valor de autoenergía utilizando un término que incluye la función de Green que describe la propagación de una partícula en el sistema de muchos electrones y el potencial coulombiano apantallado<sup>(7)</sup>. Para el cálculo auto-consistente necesario para obtener la estructura electrónica se utilizaron 112 puntos k en la 1BZ generados de una grilla de 10X10X14.

### Propiedades ópticas y modulo de bulk

Las funciones dieléctricas se calcularon con las autofunciones correspondientes al cálculo autoconsistente, calculando el elemento de matriz correspondiente al operador momento dipolar que para la parte imaginaria del tensor dieléctrico complejo <sup>(8)</sup> está dado por:

$$\varepsilon_2(w)_{\alpha\beta} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 w^2} \sum_{i,f} \langle f | p_\alpha | i \rangle \langle f | p_\beta | i \rangle \times W_i (1 - W_f) \delta(E_f - E_i - \hbar\pi) d^3 k \quad (1)$$

Donde  $\langle f | p_j | i \rangle$  es la matriz dipolar, y f, i son los estados final e inicial respectivamente.  $W_i$  es la función de distribución de Fermi para el estado i-ésimo, y  $E_i$  es la energía del electrón en el i-ésimo estado, siendo  $\alpha$  y  $\beta$  componentes en coordenadas cartesianas, entonces el tensor dieléctrico complejo es de la forma:

$$\varepsilon(w) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2(w) = N^2 \quad (2)$$

Donde las partes real e imaginaria son funciones del indice de refracción complejo N. De la parte imaginaria del tensor dieléctrico se obtiene la correspondiente parte real por medio de las relaciones de dispersión de Kramers-Kronig:

$$\varepsilon_1(w)_{\alpha\alpha} = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{w' \varepsilon_2(w')_{\alpha\alpha}}{w'^2 - w^2} dw' \quad (3)$$

El índice de refracción complejo esta dado por:

$$N(w) = n(w) + ik(w) \quad (4)$$

Donde la parte real es el índice de refracción y la parte imaginaria representa el coeficiente de extinción <sup>(9)</sup>. La reflectividad R y el coeficiente de absorción  $\alpha$  están dados por:

$$\Re(w) = \frac{|1 - N(w)_{\alpha\alpha}|^2}{|1 + N(w)_{\alpha\alpha}|^2} \quad (5)$$

$$\alpha(w)_{\alpha\alpha} = \frac{2w}{c} \left( \frac{-\varepsilon_1(w)_{\alpha\alpha} + \hat{U}\varepsilon(w)_{\alpha\alpha}\hat{U}}{2} \right)^{1/2} = \frac{2w}{c} k(w)_{\alpha\alpha} \quad (6)$$

Por otra parte una de las propiedades mecánicas más utilizadas para el cálculo asociado a materiales es el módulo de bulk, que muestra principalmente la capacidad de restitución de un sólido sometido a presión hidrostática, también conocido como modulo de incompresibilidad, por definición el modulo de bulk está dado por:

$$B = -V \frac{\partial V}{\partial P} \quad (7)$$

Donde P es la presión y V el volumen del sistema, el inverso del modulo de bulk corresponde a la compresibilidad del material. Una ecuación de estado fue derivada por Murnaghan, y mejorada junto a birch en 1947<sup>(10,11)</sup>. Esta escribe la energía en función del volumen del sólido, y permite ajustar los resultados obtenidos mediante el cálculo de la energía del sistema a diferentes variaciones de volumen para así obtener el valor del modulo de bulk<sup>(12)</sup>, esta ecuación está dada por:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \times \left\{ \left[ \frac{V_0^{2/3}}{V} - 1 \right]^3 B_0' + \left[ \frac{V_0^{2/3}}{V} - 1 \right]^2 \left[ 6 - 4 \frac{V_0^{2/3}}{V} \right] \right\} \quad (8)$$

Donde  $B_0'$  es un parámetro de ajuste y  $B_0$  es el modulo de bulk. Para esto calculamos la energía para diferentes variaciones de volumen desde -6% hasta +6%.

### Propiedades elásticas y piezoeléctricas

Para el cálculo de las matrices elásticas, se relajo la estructura, haciendo que la fuerza sobre los núcleos sea nula, configurando la celda en equilibrio, esta fuerza se halla mediante el teorema de Hellmann-Feymann <sup>(13,14)</sup>, dado por:

$$F_i = - \frac{dE_e}{dR_i} \quad (9)$$

Y el estrés de la estructura se obtiene mediante el teorema de Nielsen-Martin <sup>(15)</sup>:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \sum_i \left\{ \frac{P_{i,\alpha} - P_{i,\beta}}{m_i} + \sum_{j \neq i} \Gamma_{i,\alpha} \nabla_{i,\alpha} V_{ij} \right\} \quad (10)$$

Donde E es la energía del sistema R son las coordenadas nucleares, P es el momento lineal y V es el termino de interacción colombiano. La función de onda de primer orden se calcula para cada átomo en todas las direcciones; esta función de onda se utiliza para calcular la segunda derivada de la energía E, con respecto a todos los pares de desplazamientos atómicos fuera de sus posiciones de equilibrio, este es el tensor de fuerzas interatómicas K:

$$K_{ij} = \Omega_0 \left. \frac{d^2 E}{du_i du_j} \right|_{\varepsilon, \eta} \quad (11)$$

Donde  $\Omega_0$  es el volumen de la celda,  $\mathcal{E}$  el campo eléctrico homogéneo y  $\eta$  la deformación homogénea. Posteriormente se calculan las segundas derivadas de E con respecto al desplazamiento de un átomo y con respecto a uno de los componentes de  $\epsilon$  este forma el tensor dinámico carga efectiva (carga efectiva de Born):

$$Z_{ia} = -\Omega_0 \left. \frac{d^2 E}{du_i d\epsilon_a} \right|_{\eta} \quad (12)$$

Donde a, representa la coordenada cartesiana de la componente. Este tensor se utiliza para calcular la contribución atómica a la relajación los tensores elásticos y piezoeléctricos <sup>(16)</sup>, se computan las funciones de onda para una perturbación de deformación aplicada sobre el sistema que se utilizan para calcular tres tipos de segundas derivadas de energía E, primero las derivadas con respecto a dos componentes de la tensión, que dan como resultado el tensor elástico de iones congelados:

$$\bar{C}_{\alpha\beta} = \left. \frac{d^2 E}{d\eta_\alpha d\eta_\beta} \right|_{u,\epsilon} \quad (13)$$

Donde  $\alpha$  y  $\beta=1,2\dots 6$  en notación de Voigt. En segundo lugar se calculan las derivadas de E respecto a un esfuerzo de deformación y una componente del campo eléctrico, para hallar el tensor piezoeléctrico de iones congelados (frozen-ion piezoelectric tensor):

$$\bar{e}_{\alpha\beta} = \left. \frac{d^2 E}{d\epsilon_a d\eta_\beta} \right|_{u} \quad (14)$$

Por último se obtienen las segundas derivadas de E con respecto a un esfuerzo y un desplazamiento atómico, que da como resultado el tensor de fuerzas internas <sup>(17)</sup>:

$$\Lambda_{ia} = -\Omega_0 \left. \frac{d^2 E}{du_i d\eta_\alpha} \right|_{\epsilon} \quad (15)$$

### III. DISCUSION DE RESULTADOS

#### Estructura electrónica y corrección GW

La estructura electrónica del CdSe se calculo empleando pseudopotenciales Troullier-Martins, con una energía de corte de 20 eV para el cálculo autoconsistente GS. Los cálculos de la DOS abarcan en un rango de energías de -10 eV a 10 eV a lo largo del camino  $\Gamma - A - H - K - \Gamma - M - L - A$  en la zona de Brillouin (1BZ).

En la estructura de bandas Fig. 2 se puede observar que el sistema es un semiconductor de gap directo, con un  $E_g$  de 0,41eV, el gap se encuentra en el punto  $\Gamma(0,0,0)$ . La estructura de bandas presenta degeneraciones en las bandas en los caminos en la 1BZ:  $\Gamma - A$  y  $H - K - \Gamma - L - M$ , donde las bandas están doblemente degeneradas, se pueden diferenciar 2 grupos principales de bandas, la primera en el rango de energía que va desde -8,5 hasta -7,3 eV y la segunda en el rango de -4,8 a 0 eV.

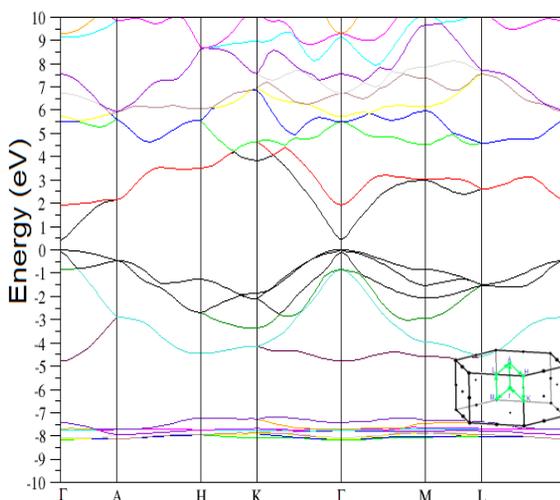


Figura 2. Estructura de bandas del CdSe calculada con la aproximación GGA.

De la DOS se puede notar que el grupo de bandas más profundas corresponden a los orbitales s de Se principalmente, con una leve contribución de los d del Cd Fig.3, el grupo de bandas que inicia en -8,5 eV está compuesta casi totalmente por los orbitales d del Cd el grupo superior de bandas está conformado por en su mayoría por los orbitales p del Se.

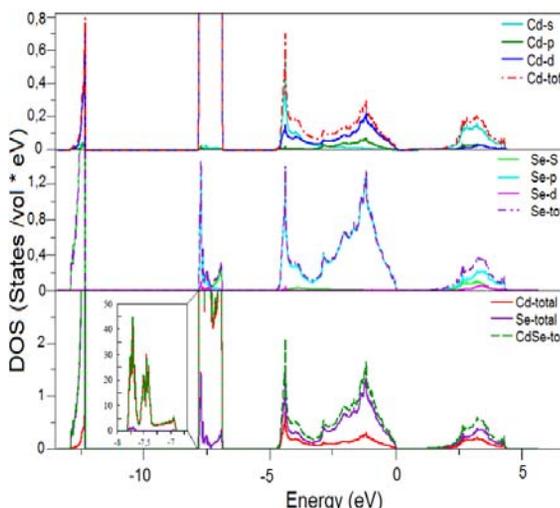


Figura 3. Densidad de estados del CdSe. Comparación de la densidad de estados del Cd, Se y DOS total del compuesto.

La estructura electrónica reportada a partir de cálculos GGA con la aproximación de pseudopotenciales subestima el valor del band gap  $E_g=0,408$  eV, usando la aproximación GW de la teoría de perturbaciones, se calculo la corrección para las primeras 4 bandas de conducción tomando un rango de energía de -4,5 a 7,5 eV en el camino  $K - \Gamma - M$  Fig. 4, obteniéndose un valor de gap  $E_g=1,67$ eV más próximo a los valores experimentales reportados.

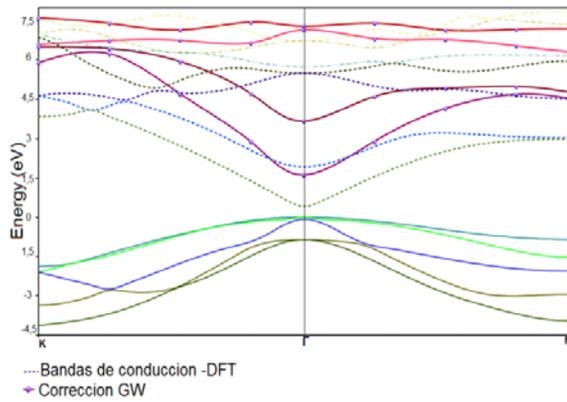


Figura 4. Comparación de la estructura de bandas en el camino K-G-M obtenida con DFT y con la corrección GW.

Tabla 1. Band gap calculado en comparación con los obtenidos experimentalmente por otros autores.

	Presente trabajo	Experimental <sup>(a)</sup>	Experimental <sup>(b)</sup>
Band gap (eV)	1,67	1,74	1,67

<sup>(a)</sup>Ref (18) <sup>(b)</sup>Ref(19)

### Propiedades ópticas y modulo de bulk

Las propiedades ópticas del CdSe se hallaron analizando la convergencia empleando 84 y 112 puntos k, hallando que se obtiene convergencia con 84 puntos k en la 1ZB sin la inclusión de la interacción spin-orbita. Se calculo entonces la función dieléctrica, donde para se puede notar que el CdSe presenta isotropía en dirección xx e yy en todo el rango de energía estudiado tanto en la parte real como imaginaria de la función Fig. 5.

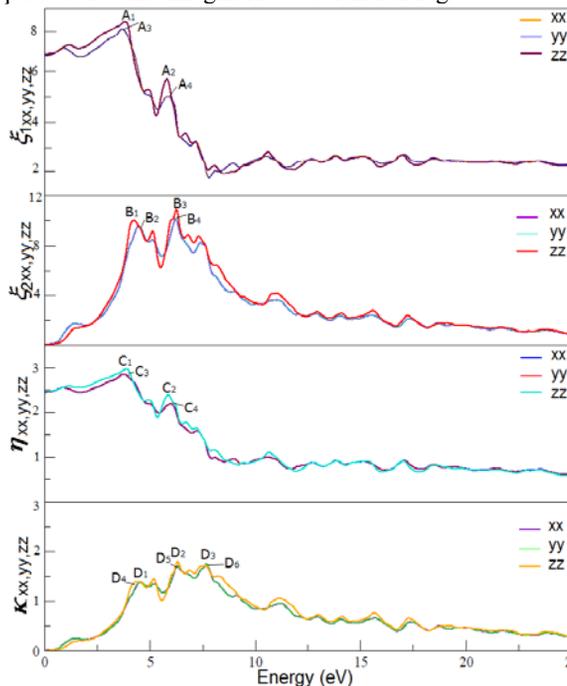


Figura 5. propiedades ópticas del CdSe. (Niveles de arriba abajo) Parte real e imaginaria de la función dieléctrica. Índice de refracción. Coeficiente de extinción.

En la parte real se observan 2 picos, el pico más pronunciado se encuentra a 3,8 eV y el menor a 5,8 eV en las direcciones xx e yy, mientras que en la dirección zz se encuentran 2 picos levemente corridos, uno a 4 eV y otro a 5,5 eV. En la parte imaginaria se encuentran 2 picos notables en todas las direcciones el primero en 4,2 en la dirección zz y en 4,4 en las direcciones xx e yy, y el segundo en 6,3 para xx, yy y zz.

Tabla 2. Función dieléctrica presentada en este trabajo en comparación con otros autores.

pico	A <sub>1</sub>	A <sub>3</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>4</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>3</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>4</sub>
presente trabajo	4,3	4,3	6,2	6,3	4,7	4,5	6,4	6,4
Experimental <sup>(a)</sup>						4,2		5
Excitonic <sup>(a)</sup>						4,4		5,7
Experimental <sup>(a)</sup>						4,3		8,7
GGA <sup>(b)</sup>		4		6,3		5,5		10
LDA <sup>(c)</sup>						5,5		5,3

<sup>(a)</sup>Ref(20) <sup>(b)</sup>Ref(21) <sup>(c)</sup>Ref(22)

Los picos representados en la grafica anterior de la parte real e imaginaria de la función dieléctrica que incluye la corrección obtenida mediante la GW presentan un buen ajuste respecto a los obtenidos experimental y teóricamente por otros autores y tienen correspondencia con la grafica de índice de refracción y coeficiente de extinción Fig. 5 respectivamente, los picos de la curva de la parte imaginaria se ven correspondidos además en la reflectividad Fig. 6 debido a su relación matemática; se puede observar también que el material se comienza a comportar casi isotrópicamente después de los 20 eV.

La representación de la conductividad óptica y el coeficiente de absorción guardan una estrecha coincidencia en el comportamiento y distribución de picos en el rango energético, presentando en todo en los dos casos picos paralelos con diferentes intensidades en las 3 direcciones.

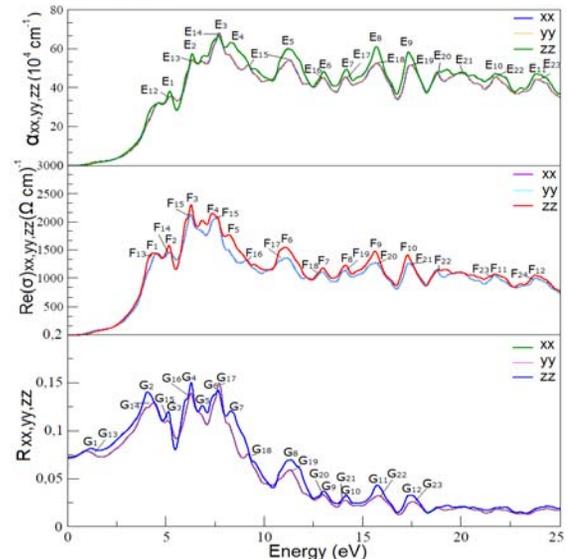


Figura 6. (Niveles de arriba abajo) Coeficiente de absorción. Conductividad óptica Reflectividad.

Se halló un ajuste entre los resultados de varias simulaciones, mediante métodos ab-initio basados en la DFT, en las que hallamos diferentes valores de volumen y energía (calculamos la energía para diferentes variaciones de volumen desde -6% hasta +6%), estos datos se ajustaron por medio de la ecuación de Birch-Murnaghan Fig. 7, obteniéndose un módulo de bulk de 47 GPa.

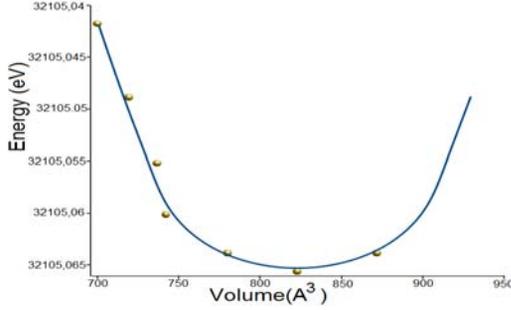


Figura 7. Ajuste energía vs volumen mediante la ecuación de Birch-Murnaghan.

### Propiedades elásticas y piezoeléctricas

Se realizó el cálculo perturbativo RF para los tensores piezo-elásticos del CdSe optimizando de la estructura mediante el algoritmo BFGS y mediante la herramienta ANADDB (Analysis of Derivative DataBase) obtuvimos el tensor elástico inverso (compliance tensor) que se obtiene por inversión del tensor elástico  $\bar{C}_{\alpha\beta}$ , el tensor de tensión interna que representa el desplazamiento en respuesta a una tensión y por último los tensores elásticos y piezoeléctricos con iones anclados y relajados.

El tensor elástico con átomos relajados resulta de la combinación de la segunda derivada para tensión interna y las constantes de la fuerza interatómica; mientras que el tensor piezoeléctrico con átomos relajados toma en cuenta las segundas derivadas para la tensión interna, constantes de fuerza interatómica, y cargas efectivas de Born. Las matrices en notación de Voigt que describen entonces el comportamiento elástico del material son:

$$C_c = \begin{bmatrix} 4,6705891 & 1,5290886 & 0,2410469 & -0,0000008 & 0,0000018 & -0,000001 \\ 1,5290886 & 4,6705811 & 0,2410474 & -0,0000002 & -0,0000000 & 0,0000017 \\ 0,2410484 & 0,2410504 & 1,1363779 & -0,0000024 & 0,0000000 & 0,0000039 \\ -0,0000000 & -0,0000000 & -0,0000000 & 0,2476656 & -0,0000004 & -0,000000 \\ -0,0000000 & -0,0000000 & 0,0000000 & -0,0000004 & 0,2476690 & -0,000000 \\ 0,0000016 & -0,0000002 & -0,0000004 & -0,0000000 & -0,0000000 & 1,5707520 \end{bmatrix}$$

Donde  $C_c$  es el tensor elástico clamped ion en unidades  $10^2 \text{GPa}$  que comprueba que el CdSe cumple con la condición para la estabilidad mecánica de Born para cristales hexagonales, que exigen que  $C_{44} > 0$ ,  $C_{11} > |C_{12}|$ ,  $C_{11} C_{33} > (C_{13})^2$  y  $C_{33}(C_{11} + C_{12}) > 2(C_{13})^2$

$$S_c = \begin{bmatrix} 0,2411616 & -0,077158 & -0,034788 & 0,0000004 & -0,0000002 & 0,0000003 \\ -0,077158 & 0,2411620 & -0,034788 & -0,0000000 & 0,0000006 & -0,0000000 \\ -0,034788 & -0,034789 & 0,8947477 & 0,0000086 & 0,0000001 & -0,0000002 \\ -0,0000000 & 0,0000000 & 0,0000000 & 4,0377030 & 0,0000065 & 0,0000000 \\ 0,0000000 & 0,0000000 & -0,0000000 & 0,0000065 & 4,0376472 & 0,0000000 \\ 0,0000002 & 0,0000002 & 0,0000001 & 0,0000000 & -0,0000000 & 0,6366377 \end{bmatrix}$$

Donde  $S_c$  es el compliance tensor en unidades  $10^{-2} \text{GPa}^{-1}$ . En este caso las matrices elásticas  $C_c$  y  $S_c$  elásticas muestran un comportamiento anisotrópico del tipo transversalmente isotrópico, debido a que las constantes del tensor elástico cumplen con la relación  $C_{11}=C_{22}$ ,  $C_{12}=C_{21}$ ,  $C_{13}=C_{23}=C_{31}=C_{32}$ ,  $C_{44}=C_{55}$ ,  $C_{66}=(C_{11}-C_{12})/2$  y también que  $C_{33}$ , es diferente y las demás constantes tienden a 0.

A partir de la condición de isotropía transversal pueden hallarse constantes elásticas: módulo de Young en dirección  $E_x=E_y \neq E_z$ , la relación de Poisson  $\nu_{xz}=\nu_{yz} \neq \nu_{xy}$  y el módulo de cizalladura  $G_{xz}=G_{yz} \neq G_{xy}$ , del compliance tensor.

Tabla 3. constantes elásticas del CdSe.

$E_1=E_2$	$E_3$	$\nu_{13}=\nu_{23}$	$\nu_{12}$	$G_{13}=G_{23}$	$G_{12}$
414,659	111,763	0,144	0,319	22,851	157,075

La matriz piezoeléctrica anisotrópica en unidades  $\text{C/m}^2$  obtenida es:

$$e_c = \begin{bmatrix} 0,000 & 0,000 & 0,35800518 \\ -0,000 & 0,000 & 0,35800935 \\ 0,000 & 0,000 & -0,74612283 \\ 0,000 & 0,38550299 & 0,00000034 \\ 0,38550827 & 0,000 & 0,00000109 \\ 0,000 & 0,000 & -0,00000265 \end{bmatrix}$$

Calculamos el módulo de bulk anisotrópico a lo largo de los ejes (a, b y c) a partir de sus constantes elásticas de acuerdo con las ecuaciones:

$$B_a = a \frac{dP}{da} = \frac{\Delta}{1+\alpha+\beta}, B_b = b \frac{dP}{db} = \frac{B_a}{\alpha}, B_c = c \frac{dP}{dc} = \frac{B_a}{\beta}$$

$$B_{rel} = \frac{\Delta}{(1+\alpha+\beta)^2} \quad (16)$$

Donde

$$\Delta = C_{11} + 2C_{12}\alpha + C_{22}\alpha^2 + 2C_{13}\beta + C_{13}\beta^2 + C_{33}\beta^2 + 2C_{33}\alpha\beta$$

$$\beta = \frac{(C_{22} - C_{12})(C_{11} - C_{13}) - (C_{11} - C_{12})(C_{23} - C_{12})}{(C_{22} - C_{12})(C_{33} - C_{13}) - (C_{12} - C_{23})(C_{13} - C_{23})} \quad (17)$$

Con  $a=1$ , hallándose  $B_a=B_b=36,277 \text{ GPa}$ ,  $B_c=144,365 \text{ GPa}$  y un módulo relativo de  $B_r=16,113 \text{ GPa}$ , de acuerdo con su estructura cristalina el CdSe presenta mayor dureza en el eje cristalino c mientras es igual en a y b.

### IV. CONCLUSIONES

Se calculó la estructura electrónica del CdSe obteniendo se que el band gap directo hallado mediante la aproximación GGA está subestimado comparativamente con los resultados experimentales reportados por otros autores, esto se debe que la forma del potencial de intercambio y correlación no describe correctamente los autovalores de los estados electrónicos, se logra una mejora significativa de estos resultados introduciendo la corrección GW, en la que se aproxima el valor de autoenergía mediante una función de Green.

De la DOS mostramos que la última las bandas de valencia están conformadas principalmente por los orbitales p del Se hibridizados con los d del Cd.

Las propiedades ópticas presentan una anisotropía biaxial para energías menores a 20eV después de la cual el material tiene un comportamiento isotrópico.

Por último se obtuvieron las propiedades piezo-elásticas donde se observó el comportamiento transversalmente anisotrópico encontrándose que el material es fácilmente polarizable en la dirección z; el cálculo de corrección anisotrópica del módulo de bulk agrega una corrección del 22,8% en los ejes cristalinos a y b y del 64,7% en el eje c.

## Referencias

- 1- Hohenberg, P. and Kohn, W. *Physical Review B*, 136 864 (1964).
- 2- Perdew, P. Burke, K. and Wang, Y. *Physical Review B*, 54 16553 (1996).
- 3- Phillips, J.C. and Pandey, K.C. *Physical Review Letters*, 30 787 (1973).
- 4- Rehr, J.J. *Physica Scripta*, T115 19 (2005).
- 5- Cohen, M.L. *Physical Review B*, 32 12 (1985).
- 6- Gonze, X. Beuken, J.M. Caracas, R. Detraux, F. Fuchs, M. Rignanese, G.M. Sindic, L. Verstraete, M. Zerah, G. Jollet, F. Torrent, M. Roy, A. Mikami, M. Ghosez, P. Raty, J.Y. and Allan, D.C. *Computational Materials Science*, 25 478 (2002).
- 7- Hedin, L. *Physical Review*, 139 796 (1965).
- 8- Cabuk, S. Akkus, H. Mamedov, A.M. *Physica B*, 394 81 (2007).
- 9- Suleyman, C. Sevket, S. *Central European Journal of Physics*, 6(3) 730 (2008).
- 10- Murnaghan, F.D. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 30 9 244 (1944).
- 11- Birch, F. *Physical Review*, 71 809 (1947).
- 12- Ziambaras, E. Schroder. E. *Physical Review B*, 68 064112 (2003).
- 13- Hellmann, H. *Einführung in die Quantenchemie*. Leipzig: Franz Deuticke, 285 (1937).
- 14- Feynman, R. P. *Physical Review*, 56 (1939).
- 15- Nielsen, O.H and Martin, R. *Physical Review Letters*, 50 697 (1983).
- 16- Mousavi, M. Kompany, A. Roknabad, MR. Arabshahi, H. *Indian Journal of Science and Technology*, 3 6 (2010).
- 17- Vanderbilt D. Notes relevant to the ANADDB module of ABINIT, (2004)
- 18- Kucur, E. Riegler, J. Urban, G. and Nann, T. *Journal of Chemical Physics*, 119 4 (2003).
- 19- Patidar, D. Rathore, S. Saxena, S. Sharma, T. *Chalcogenide Letters*, 5 (2008).
- 20- Kim, D. Klein, S. Ren, F and Chang, H. *Physical Review*, 8(1994).
- 21- Huang, P, Cheng, D. Wu, S. Hu, M. Shen, J. *Appl. Phys. Lett.* 90(2007).
- 22- Wang, L. and Zunger, A. *Physical Review B*, 53(1996).