



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXIII SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA - 2019

Estudo das propriedades ópticas, eletrônicas e estruturais da liga de nitreto de alumínio dopado com antimônio ($\text{AlSb}_{1-x}\text{N}_x$) na fase FCC

Gabriel Pereira Silva¹; Nilton Souza Dantas²

1. Bolsista PIBIC/FAPESB, Graduando em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: biel.silva2802@gmail.com
2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: nilton.dantas@gmail.com

PALAVRAS-CHAVE: Nitreto de Alumínio, Propriedades eletrônicas, Dopagem.

INTRODUÇÃO

Foram conduzidos estudos teóricos através de modelagem computacional do cristal $\text{AlSb}_{(1-x)}\text{N}_x$, onde o valor de x varia entre 0 – 1. Embora o AlN seja um material bem estudado, há pouca informação sobre a dopagem desse material com um **não metal**, sendo esta área de estudos ainda carente de maiores informações. Além disso, a inserção de uma impureza muito diferente dos átomos originais (O Sb tem número atômico 51, sendo muito mais pesado que o Al e o N), pode implicar modificações físicas notáveis no material original. Aplicando a Teoria do Funcional da Densidade [4,5], tal como está implementada no pacote computacional WIEN2k [6,7], pode-se calcular, via Primeiros Princípios, ou seja, sem usar dados experimentais, a energia de formação do cristal e, a partir daí, todas as propriedades de interesse. O software WIEN2k permite o cálculo da densidade de estados, do *GAP* óptico, da função dielétrica e das propriedades estruturais.

MATERIAL E MÉTODOS OU METODOLOGIA (ou equivalente)

O trabalho seguiu a seguinte metodologia, a qual é a metodologia clássica para simulação computacional via Teoria do Funcional da Densidade (DTF):

- 1 – criação da célula unitária FCC do AlN, minimização da energia de formação do cristal e ajuste de seus parâmetros de rede àqueles encontrados na literatura; a escolha da geometria FCC se fundamenta no conhecimento, incluindo trabalhos deste coordenador, de que essa é a estrutura mais estável para os materiais III-nitretos[8,9];
- 2 – cálculo das propriedades de interesse do AlN e comparação com aqueles encontrados na literatura;
- 3 – criação de uma supercélula, a partir da célula uniescrita do artigo e da apresentação para o semic. escrita do relatório finaltária otimizada do AlN de acordo com o item 1;
- 4 – utilização da supercélula gerada em (3) para simular a inserção (dopagem) da impureza antimônio (Sb) em todas as concentrações propostas ($x = 0; 0,25; 0,50; 0,75$ e $1,0$);
- 5 – minimização da energia de formação da célula do cristal dopado tal como no item 1;
- 6 – cálculo das propriedades propostas em para cada dopagem do material original;

RESULTADOS E/OU DISCUSSÃO (ou Análise e discussão dos resultados)

Os valores obtidos ao otimizar os parâmetros de rede encontram-se na tabela 1

Tabela 1 - Parâmetro de rede

$\text{AlSb}_{1-x}\text{N}_x$	Parâmetro de rede (Å)
X = 0	8.440068
X = 0.25	9.837643
X = 0.50	10.717226
X = 0.75	11.429969
X = 1.00	11.951744

Com o parâmetro otimizado, foi obtida a estrutura de bandas, a densidade de estados e a função dielétrica para cada concentração.

Usando os dados da tabela 1, fez-se o gráfico dos parâmetros de rede, figura 1.

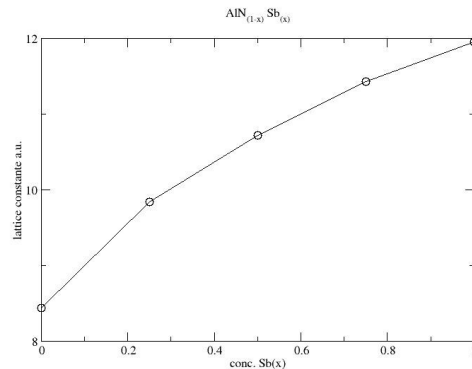


Figura 1 - Parâmetro de rede

Observou-se que a curva tem um comportamento não-linear, não seguindo a Regra de Vegard, que diz que ao variar o parâmetro de rede, substituindo átomos, se essa variação for linear a estrutura cristalina tende a manter a estrutura original [8].

As figuras 2 e 3 mostram as densidades de estados total de AlN e AlSb, respectivamente.

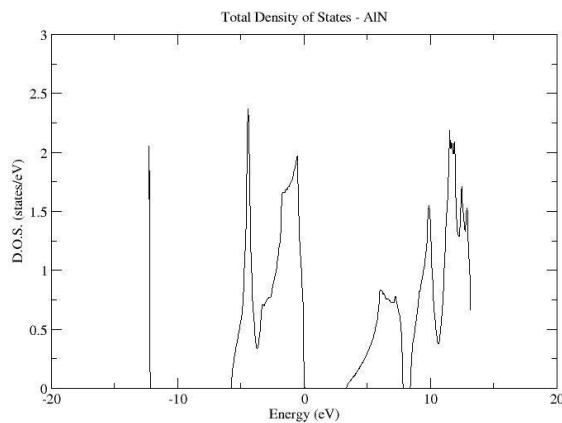


Figura 2

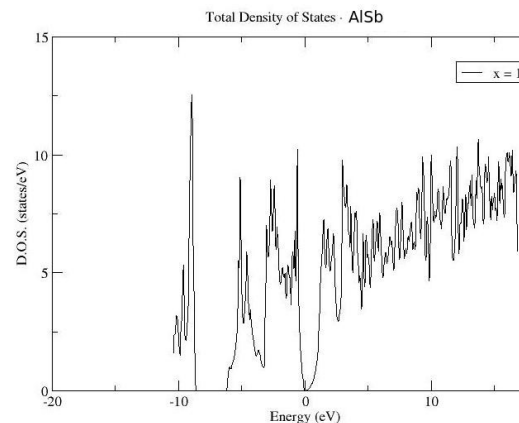


Figura 3

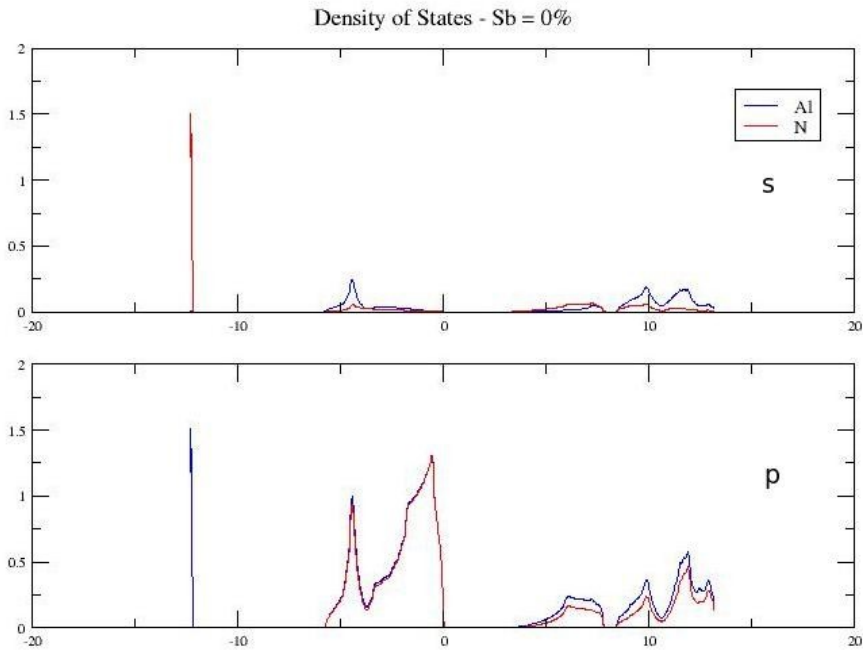


Figura 4

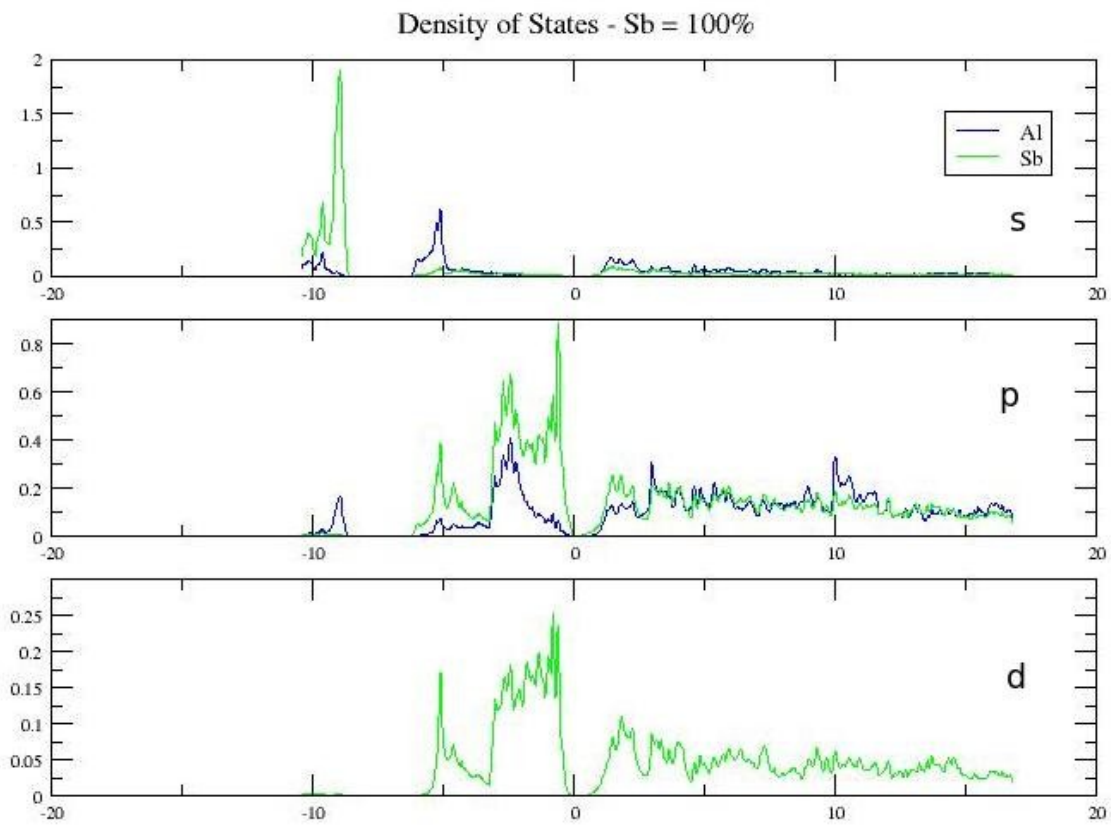


Figura 5

Comparando Figura 2 com Figura 3 nota-se que há uma diminuição no *gap óptico*, tomando-se como referência o topo da banda de valência, representado pelo nível de

Fermi. Isso acontece porque no AlSb o antimônio tem 51 elétrons, distribuídos entre cinco níveis de energia, os quais geram uma diminuição natural do *gap óptico*. Esse efeito pode ser observado no processo de substituição do N, no AlN, pelo Sb, quando fez-se a simulação para os seguintes valores de $x=0,25$; $0,50$ e $0,75$. Devido à limitação do número de páginas, os gráficos não serão apresentados. As figuras 4 e 5 mostaram as densidades de estados parciais de AlN e AlSb. Analisando a distribuição das bandas *s*, *p* e *d*, observamos que o topo da banda de valência é formado, predominantemente pelas bandas *p*, e *d* de Al, N e Sb. Já a banda de condução é formada, predominantemente pela banda *d* do Sb.

Calculou-se as constantes elásticas para o AlN e o AlSb tabela 1.

Tabela 2 – Constantes elásticas

Constantes	AlN (GPa)	AlSb (GPa)
C11	319.99	78.27
C12	186.73	36.14
C44	206.10	54.31

A tabela 2 mostra as constantes elásticas dos materiais estudados. Essas constantes estão relacionadas com a características estruturais dos materiais e sugerem que o AlN é um material mais duro que o AlSb.

CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

Foram feitas simulações computacionais, baseadas em métodos de primeiros princípios, sobre a dopagem de AlN com Sb, de modo a entender como os parâmetros eletrônicos, mecânicos e ópticos variam quando aumentamos a concentração de Sb. Contrariamente ao AlN, o AlSb ainda é um material pouco estudado e esperamos contribuir para o entendimento de suas propriedades. Os estudos são preliminares e daremos continuidade pois outros resultados obtidos, e que estão fora do escopo original desse trabalho, ainda precisam ser melhor compreendidos.

REFERÊNCIAS

- [1] https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2014/, acessado em 13/08/2019.
- [2] LEVINSHTEIN, M. E.; RUMYANTSEV, S. L.; SHUR, M. S. Properties of Advanced Semiconductor Materials (Wiley-Interscience, New York, 2001), ISBN 0-471-35827-4.
- [3] PANKOVE, J. I. Optical Processes in Semiconductors (Dover Publications, New York, 1975).
- [4] HOHENBERG, P.; KOHN, W. Phys. Rev. B, v. 136, p. 864-871, 1964.
- [5] KOHN, W.; SHAM, L. J. doi: 10.1103/PhysRev. 140. A1133. Phys. Rev. A, v. 140, p. 113, 1965.
- [6] <http://www.wien2k.at/>
- [7] Blaha P. *et al* 2001 WIEN2k, An Augmented Plane Wave+ Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties Karlheinz Schwarz, Techn. Universitaet Wien, Wien Austria, 2013.
- [8] DENTON, Alan R.; ASHCROFT, Neil W. Vegard's law. Physical review A, v. 43, n. 6, p. 3161, 1991.