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 da transição metal/isolante do TINAs

Carlos Rodolfo Bomfim Lopes Souza¹; Álvaro Santos Alves²

1. Bolsista PIBIC/Fapesb, Graduando em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: crblsouza@gmail.com

2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: asa@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: TINAs; DFT; semicondutor.

INTRODUÇÃO

Os compostos do grupo III-V têm sido estudados nas últimas quatro décadas devido às suas propriedades eletrônicas e ópticas que são de interesse da indústria. Por causa da possibilidade de ajuste dessas propriedades por meio do controle da composição de ligas, pode-se criar materiais com as características desejadas. Por exemplo, a conhecida liga ternária $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é usada na fabricação de laser semicondutores e guias de onda baseados em filmes finos. Nos últimos dez anos, os III-nitretos ganharam a atenção dos pesquisadores principalmente por causa da criação do LED azul de alta eficiência, feito de GaN (Nakamura, Pearton & Fasol, 2013). Geralmente os compostos binários III-V, em especial os III-nitretos, possuem *gap* largo, maior que 1,5 eV (Vurgaftman, Meyer & Ram-Mohan, 2001). Estudos publicados na última década mostram que a inclusão de Tl em III-nitretos provoca a diminuição do *gap* (Dantas, De Almeida, Ahuja, Persson, & Ferreira da Silva, 2008). Recentemente, foi mostrado que o TIN pode ser um isolante topológico ou semi-metal a depender da interação spin-órbita (Sheng *et al.*, 2014). Isso abre um novo campo de investigação no subconjunto dos materiais III-V, em especial, ligas e compostos contendo Tl, pois pode-se criar materiais de caráter metálico ou isolante através do ajuste do acoplamento spin-órbita e da composição da liga, sem que haja mudança na estrutura cristalina ou perda de simetria no material. Nesse contexto, este plano de trabalho se propõe a investigar, utilizando métodos em primeiros princípios, a liga $\text{TlN}_{1-x}\text{As}_x$. Os cálculos foram feitos utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) (Hohenberg & Kohn, 1964) (Kohn & Sham, 1965), implementada no pacote computacional exciting-code! (Gulans *et al.*, 2014).

MATERIAL E MÉTODOS OU METODOLOGIA (ou equivalente)

Todos os cálculos foram realizados usando a DFT e as equações de Kohn-Sham resolvidas, para todos os elétrons, usando Ondas Planas Linearizadas e Aumentadas (FP-LAPW). O funcional de troca e correlação utilizados foram usado é a Aproximação do Gradiente Generalizado, parametrizado por Perdew, Burke e Ernzerhof (PBE-GGA) e a Aproximação da Densidade Local (LDA). Todo o formalismo já está implementado no pacote computacional exciting-code!. O primeiro passo foi modelar a liga em uma

estrutura cristalina zinblende. O parâmetro de rede foi obtido através da otimização da estrutura cristalina, com o auxílio da equação de estado de Birch-Murnaghan. Também obtivemos o bulk modulus e a sua derivada. Na próxima etapa, calculamos as propriedades eletrônicas. Com os autovalores encontrados no cálculo das equações de Kohn-Sham, foi possível fazer a estrutura de bandas da liga parametrizando um caminho que passa pelos pontos de alta simetria do cristal, depois foi calculada a densidade de estados. Por último, as propriedades mecânicas são dadas pelo tensor elástico, que foi obtido a partir das segundas derivadas da energia total em relação a pequenas deformações no cristal.

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

Encontramos o parâmetro de rede de equilíbrio, o bulk modulus e a derivada com respeito à pressão dos materiais $\text{TiN}_{1-x}\text{As}_x$, com $x=0, 0.25, 0.50, 0.75$ e 1 :

Tabela 1. Parâmetros estruturais de cada material $\text{TiN}_{1-x}\text{As}_x$

x	a (angs)	B ₀ (GPa)	B' ₀
0	5.282	87.560	4.938
0.25	5.563	66.471	5.133
0.50	5.837	53.033	5.069
0.75	6.110	42.995	4.978
1	6.375	36.76	5.54

O gráfico abaixo mostra como o parâmetro de rede e o bulk modulus variam com a concentração de As:

Figura 1: Variação do parâmetro de rede e do bulk modulus da liga $\text{TiN}_{1-x}\text{As}_x$ com a concentração de As ($x=0.00, 0.25, 0.50, 0.75$ e 1.00).

Observa-se que à medida em que cresce a concentração de As, o parâmetro de rede cresce segundo a Lei de Vegard. As células também vão se tornando mais compressíveis. Com os parâmetros estruturais de equilíbrio, foi possível calcular a estrutura eletrônica de cada material:

Figura 2: Estrutura de bandas e densidade de estados do TIN.

Figura 3: Estrutura eletrônica do $\text{TIN}_{0.75}\text{As}_{0.25}$.

Figura 4: Estrutura eletrônica do $\text{TIN}_{0.25}\text{As}_{0.75}$.

Figura 5: Estrutura eletrônica do TIAs.

CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

Os resultados preliminares mostram que a célula unitária do TINAs cresce segundo a lei de Vergard. A estrutura eletrônica do TIN revela que é um semiconductor de gap muito pequeno (0.05 eV) e que surge devido ao acoplamento spin-órbita. A hibridização dos estados 5d do Tl com os estados p do ânion sugere que o mecanismo de separação de bandas e abertura do gap é uma competição entre o efeito do acoplamento spin-órbita sobre os estados 5d e p. Com concentração de 25% de As, o material já apresenta caráter metálico. Nota-se que, em geral, a banda de condução é formada pelos estados 6s do Tl, enquanto que a banda de valência tem caráter predominante advindo dos estados p do ânion ligado ao Tl.

REFERÊNCIAS

- DANTAS, N. Souza et al. Novel semiconducting materials for optoelectronic applications: Al Tl x N alloys. **Applied Physics Letters**, v. 92, p. 121914, 2008.
- GULANS, Andris et al. Exciting: a full-potential all-electron package implementing density-functional theory and many-body perturbation theory. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 26, n. 36, p. 363202, 2014.
- HOHENBERG, Pierre; KOHN, Walter. Inhomogeneous electron gas. **Physical review**, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964.
- KOHN, Walter; SHAM, Lu Jeu. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. **Physical review**, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965.
- NAKAMURA, Shuji; PEARTON, Stephen; FASOL, Gerhard. **The blue laser diode: the complete story**. Springer Science & Business Media, 2013.
- TIEN, P. K. Integrated optics and new wave phenomena in optical waveguides. *Reviews of Modern Physics*, v. 49, n. 2, p. 361, 1977.
- SHENG, Xian-Lei et al. Topological insulator to Dirac semimetal transition driven by sign change of spin-orbit coupling in thallium nitride. **Physical Review B**, v. 90, n. 24, p. 245308, 2014.
- VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. ár; RAM-MOHAN, L. ár. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. **Journal of applied physics**, v. 89, n. 11, p. 5815-5875, 2001.