



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

XXVI SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2022

Estudo teórico, através da Teoria do Funcional da Densidade das propriedades ópticas, eletrônicas e estruturais da liga de arseneto de alumínio dopado com fósforo (AlP_{1-x}As_x), onde x=0; 0,25; 0,50; 0,75; 1,00.

Gabriel Pereira Silva¹; Nilton Souza Dantas²

1. Bolsista PIBIC/CNPq, Graduando em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, email: biel.silva2802@gmail.com

2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: nilton.dastas@gmail.com

PALAVRAS-CHAVE: célula solar; gap óptico; função dielétrica..

INTRODUÇÃO

Esse trabalho teve como o objetivo investigar, teoricamente, as propriedades eletrônicas, ópticas e estruturais dos "Novos Materiais", assim chamados porque são apenas obtidos via tecnologia da engenharia de materiais e por tanto não são encontrados na natureza. Dentre os diversos "novos materiais" o grupo dos chamados III-V (colunas III e V da tabela periódica) tem se destacado pela sua aplicabilidade, principalmente o GaN [1]. Os semicondutores possuem uma grande versatilidade, por causa da possibilidade de incluir átomos como impurezas (assim chamadas porque não fazem parte da base de átomos que forma o cristal) no cristal original. Essa manipulação de inserir átomos na rede cristalina, pode nos fornecer muitas mudanças como no GAP óptico, mas também a dispersão de energia do espaço recíproco (também conhecida com estrutura de bandas de energia). Foram conduzidos estudos teóricos através de modelagem computacional do cristal AlP_{1-x}As_x, onde o valor de x varia entre 0 - 1. Embora exista muitos trabalhos sobre as ligas AlAs e AlP, não há muitas informações sobre o caminho de dopagem, quando partimos do arseneto de alumínio e chegamos no fosforeto de alumínio (AlAs), através da inserção de impurezas do átomo de fósforo (AlP).

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. Inicialmente, criou-se células cristalinas cúbicas para cada material, isto é, AlP, AlP_{0.75}As_{0.25}, AlP_{0.50}As_{0.50}, AlP_{0.25}As_{0.75}, AlAs;
2. Logo em seguida ajustou-se os parâmetros de rede através da minimização de energia de formação da célula unitária do cristal;
3. Em seguida, obtivemos as estruturas de banda, densidades de estado e funções dielétrica para cada célula, que são as propriedades de interesse.

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

Após otimizar as energias de formação da célula geométrica para todos os materiais investigados, foram calculados os parâmetros de rede para cada célula cristalina. A tabela 1 mostra os resultados obtidos. Os dados da tabela abaixo foram reproduzidos na figura 1 do Anexo I, que mostra que, ao adicionarmos um elemento mais pesado (As) à

nossa célula cristalina, o parâmetro de rede teve um comportamento quase linear, respeitando a Lei de Vegard [2].

Tabela 1 - Parâmetro de rede

Célula cristalina ($\text{AlP}_{1-x}\text{As}_x$)	Parâmetro de rede Å
AIP	20,83219
$\text{AlP}_{0.75}\text{As}_{0.25}$	21,031046
$\text{AlP}_{0.50}\text{As}_{0.50}$	21,168705
$\text{AlP}_{0.25}\text{As}_{0.75}$	21,454232

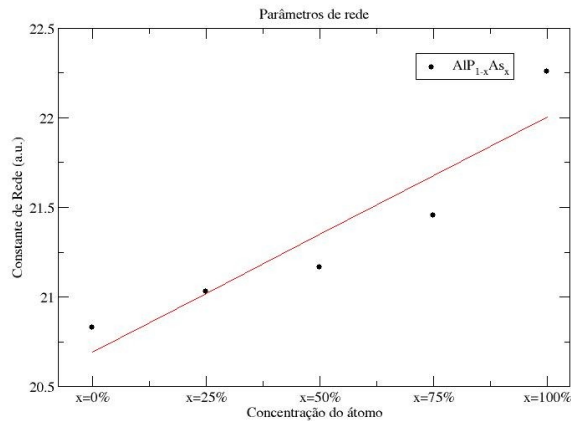


Figura 1 - Parâmetro de Rede do $\text{AlP}_{1-x}\text{As}_x$

As figuras 2 - 6 no Anexo II mostram as estruturas de bandas de energia dos materiais estudados. Os materiais estudados têm simetria cúbica e, no cálculo usamos a geometria 221 Pm-3m, de acordo com a Tabela Internacional de Cristalografia, a qual é uma célula cúbica primitiva, a qual nos mostra os seguintes pontos de alta simetria: R – Γ – X – M – Γ na célula de Wigner Seitz (rede recíproca). Em cada gráfico, a linha rotulada com E_F é a energia de Fermi, a qual sinaliza a separação entre a banda de valência (abaixo da energia de Fermi) e a banda de condução (acima da energia de Fermi). Para efeitos de análise, costuma-se tomar a energia de Fermi como origem. Embora o wien2k [3] possa calcular as energias de todos os estados eletrônicos dos átomos, as figuras com os resultados desse trabalho estão com um intervalo de energia de (-5;5) eV, pois é onde estão os dados que interessam ao escopo desse trabalho. Em todos os gráficos pode-se observar que o estado mínimo de energia da banda de condução está abaixo de 2,5 eV, o que nos sugere fortemente o comportamento de um semicondutor. Com exceção do AIP que possui um gap indireto todos os outros gráficos nos mostram um gap direto no ponto Γ da rede recíproca. O gap de banda é chamado de direto se o momento dos elétrons na região mais provável para ocorrer a transição eletrônica for o mesmo na banda de valência e de condução, ou seja, se o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorrem no mesmo ponto da célula de Wigner Seitz. Já no gap indireto a emissão do fóton ocorre com a absorção de energia por um fóton e com a variação do seu momento.

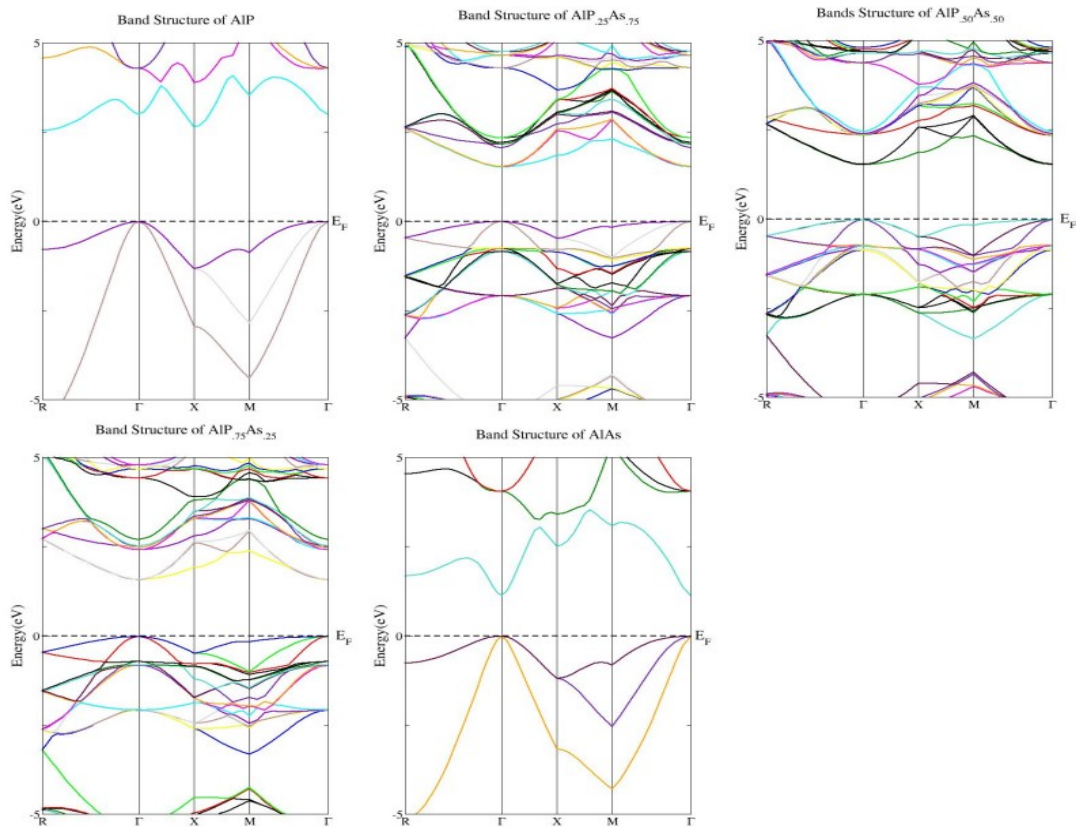


Figura 2 - 6 Estrutura de banda das ligas

As figuras 7 - 11 do Anexo III mostram as densidades de estados (DoS) na região de energia de interesse. Os gráficos mostram a DoS total de cada material, e as DoS das bandas s, p e d dos átomos constituintes dos materiais. Em todos os gráficos é possível notar uma maior predominância na região de valência, isto é, antes do corte da energia de Fermi (abaixo do zero). Pode-se notar também que a banda p teve maior participação para os átomos do não-metal, P, e para os do semimetal, As. Para a região de condução, isto é, após o corte da energia de Fermi (acima do zero), a banda s foi predominante em todos os casos.

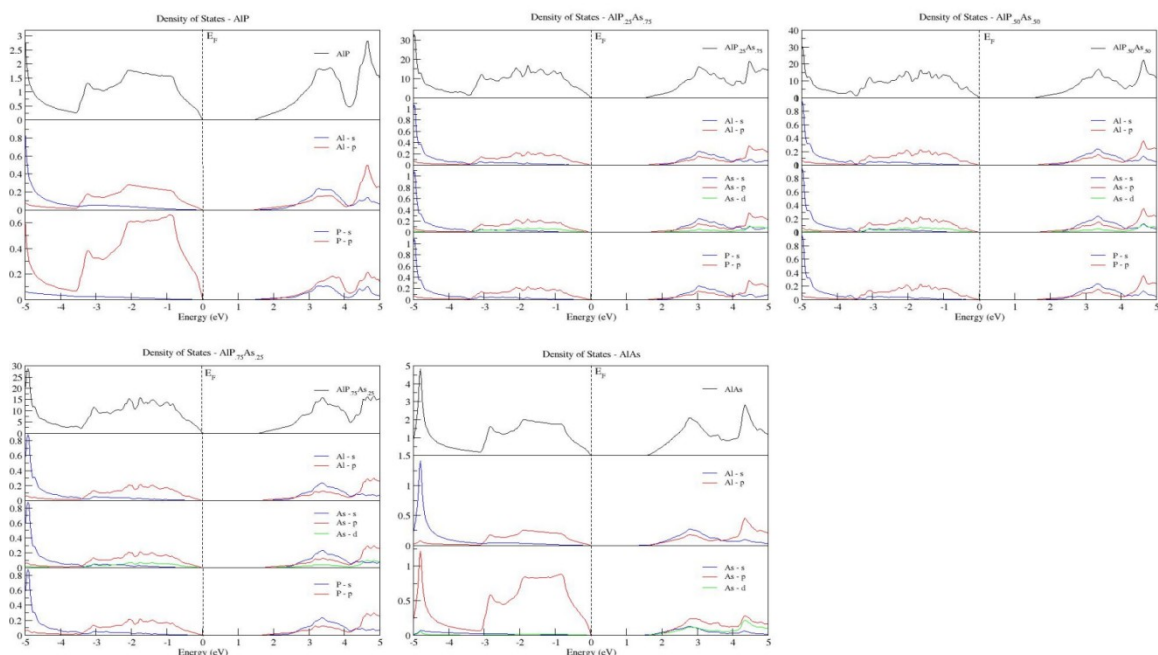


Figura 7 - 11 - Densidade de estados das ligas

As figuras 8 - 16 do Anexo IV mostram as funções dielétricas (parte Real e Imaginária) calculadas para os materiais investigados. Para os materiais AlAs, $\text{AlP}_{.25}\text{As}_{.75}$, $\text{AlP}_{.50}\text{As}_{.50}$, pode-se notar picos, entre (2;4) eV. A parte imaginária de todos os materiais mostra pequenos picos, o que pode ser um indicativo de vários gaps secundários na estrutura de banda.

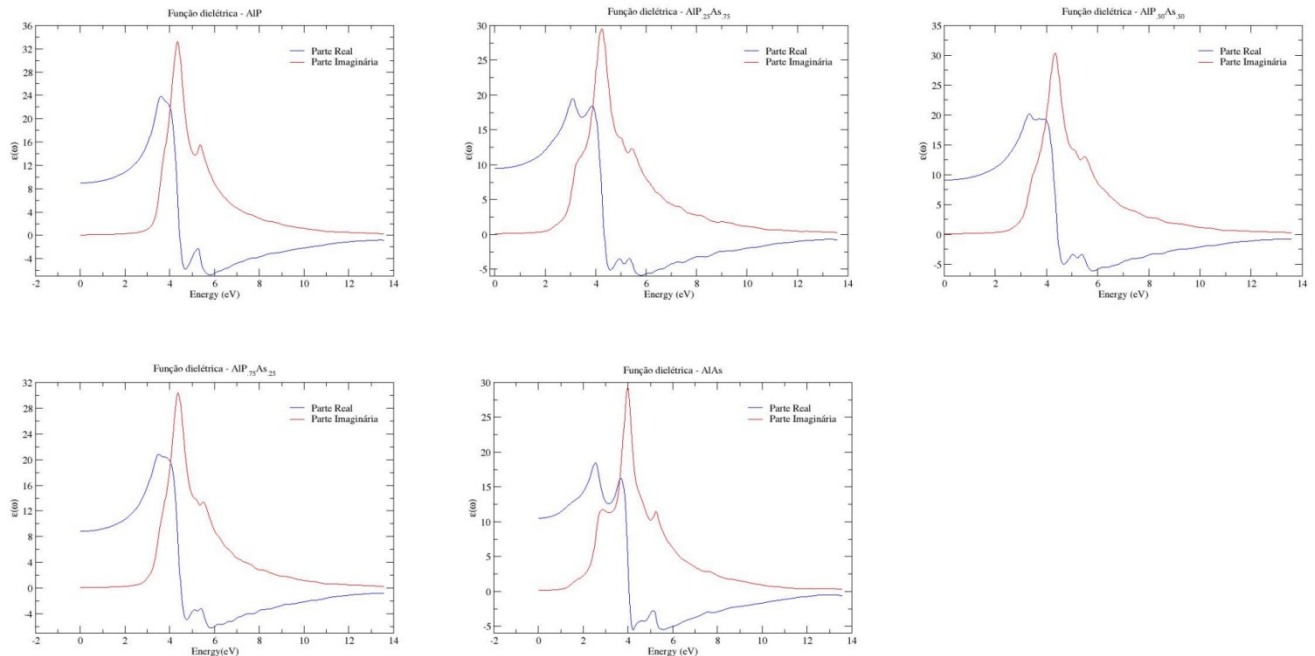


Figura 12 - 16 - Função dielétrica das ligas

CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

Esse trabalho investigou, teoricamente, as propriedades óptoeletrônicas e estruturais da liga de Arseneto de Alumínio dopado com Fósforo, ($\text{AlP}_{1-x}\text{As}_x$), onde $x=0; 0,25; 0,50; 0,75; 1,00$, de modo a entender o comportamento da liga ao adicionar um novo átomo ao seu material. Verificou-se uma variação quase linear do parâmetro de rede e conservando a estrutura cristalina da célula de origem, respeitando a Lei de Vegard. Para a estrutura eletrônica houve um *gap* ótico abaixo de 2,5 eV remetendo a possíveis semicondutores. As DoS mostram que a banda *p* teve maior predominância na camada de valência, enquanto na camada de condução foi a banda *s*. Por fim a função dielétrica mostrou picos de transição eletrônica para os materiais AlAs, $\text{AlP}_{.25}\text{As}_{.75}$, $\text{AlP}_{.50}\text{As}_{.50}$.

REFERÊNCIAS

- [1] P. Hohenberg, and W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864.
- [2] Neil W. DENTON, Alan R.; ASHCROFT. Vegard's law. Physical review A, 43:3161, 1991.
- [3] P. Blaha; K. Schwarz; G. K. H. Madsen; D. Kvasnicka and J. Luitz. Wien2k, .. Technical report, Techn. Universität Wien; Austria, 2001.