ESTUDO DO SEMICONDUTOR DE *GAP* LARGO – AlN

Kalyana Gianello Santini[1]; Adriano Manoel dos Santos[2];

[1]Estudante do Curso de Licenciatura em Física da UEMS, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: gianellosantini@gmail.com; Bolsista PIBIC/UEMS.

[2]Professor do Curso de Licenciatura em Física da UEMS, Unidade Universitária Dourados; E-mail: adriano@uems.br

Os semicondutores de *gap* largo do grupo III- Nitretos têm sido amplamente estudados devido às suas aplicações em dispositivos eletrônicos, que se dá, devido grande variação de *gap* que possuem entre si, possibilitando a cobertura de todo espectro eletromagnético. A presença do Nitrogênio torna seu *gap* mais largo que a maioria dos semicondutores e embora seja difícil a obtenção de nitretos na fase cúbica, estes apresentam maiores vantagens com relação à fase hexagonal, como uma gama maior de possíveis substratos, alta mobilidade de portadores, mais fácil dopagem tipo-p, e facilidade de emitir no azul e verde. O Nitreto de Alumínio (AlN) tem possibilidades de aplicações em dispositivos eletrônicos e fotoelétricos. Pesquisas mostraram que o AlN possui propriedades superiores, como compatibilidade química, expansão térmica, alta condutividade térmica, resistividade elétrica e excelente resistência à oxidação. No presente trabalho, foram estudadas as propriedades eletrônicas, vibracionais do AlN através dos métodos Density Functional Theory (DFT) e Valence Force Field (VFF) em estruturas *zincblende* para células com dois átomos e células com 16 átomos e a inclusão de uma vacância, comparando duas aproximações para a energia de troca e correlação – LDA e GGA. Também foram estudadas as propriedades térmicas do AlN e comparadas com a literatura. Foram obtidas informações sobre a densidade de estados eletrônica, estrutura de bandas de energia, constantes de redes, dispersão de fônons, densidade de estados vibracionais e capacidade térmica a volume constante. Todos esses resultados concordam com a literatura.

Palavras-chave: Local Density Approximation. Valence Force Field. AlN.