

Simulação da Estrutura Eletrônica e Vibracional de Si Cúbico Dopado

Kalyana Gianello Santini¹; Adriano Manoel dos Santos²

¹Estudante do curso de Física da UEMS, unidade universitária de Dourados; E-mail: gianellosantini@gmail.com

²Professor do curso de Física da UEMS, unidade universitária de Dourados; E-mail: adriano@uems.br

Física da Matéria Condensada

Resumo

Semicondutores são sólidos que no estado fundamental apresentam os estados de energia da banda de valência totalmente preenchidos. O estudo deste tipo de material pode ser utilizado para o desenvolvimento de novos materiais para a indústria tecnológica. A dopagem de cristais é feita para que se desenvolva um material com uma determinada característica eletrônica. Em cristais a resistividade elétrica é afetada sensivelmente por impurezas que lhe são adicionadas. O estudo da estrutura eletrônica e vibracional do silício cúbico dopado permite prever informações sobre o sistema que está sendo analisado. Neste trabalho será feita a caracterização teórica das propriedades físicas do silício cúbico dopado por meio de métodos *ab initio* e métodos semi-empíricos.

Palavras-chave: silício cúbico, fônons, propriedades eletrônicas, dopagem.

Introdução

O silício é um material semicondutor e apresenta a configuração eletrônica [Ne] 3s² 3p², num total de 14 elétrons. Possui uma estrutura cristalina semelhante à do diamante e propriedades eletrônicas semelhantes à do carbono. Pode ser encontrado em diferentes formas (polimorfismo), mas a rede cristalina mais comum de silício é a FCC (cúbica de face centrada), nos quais os pontos da rede se localizam nos vértices do cubo e no centro de suas faces.[1]

O processo de dopagem de semicondutores se refere à adição, ao cristal intrínseco, de pequena quantidade de impurezas com propriedades adequadas de forma que se consiga afetar o comportamento elétrico do cristal. Essas impurezas podem ser doadoras ou receptoras, e irão produzir semicondutores do tipo-n e tipo-p, respectivamente. A inclusão de uma

impureza na rede cristalina altera as suas propriedades eletrônicas e vibracionais. O estudo do comportamento vibracional é importante porque permite prever informações sobre o material estudado, como a resistividade elétrica e a condutividade térmica. [2]

Este trabalho teve como objetivo realizar simulações computacionais com o intuito de analisar o comportamento vibracional e eletrônico de impurezas substitucionais no silício cúbico.

Materiais e Métodos

A simulação da estrutura eletrônica foi baseada na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), que trata a densidade eletrônica como objeto principal para resolver um problema de n corpos. Essa teoria determina que a energia total é um funcional da densidade. Através deste método *ab initio* são feitas algumas aproximações que nos permitem dizer que a energia total. [3-4]

Para realizar a simulação eletrônica foi utilizado um pacote de simulação chamado Wien97 baseado no DFT que trabalha com o método LAPW (*Linearized Augmented Plane Wave*), onde a energia total do sistema é dada como a soma das energias cinética, energia de repulsão elétron-elétron, energia de atração elétron-núcleo, energia repulsiva colombiana e energia de troca e correlação. [5]

Primeiramente foi realizada uma simulação eletrônica do silício *bulk* com apenas dois átomos na base. Logo após foram feitas simulações com 16 átomos de Si, e com 15 átomos de Si mais uma impureza, onde foi obtida a densidade de estados eletrônicos para esses sistemas.

O cálculo das propriedades vibracionais foi baseado no modelo *Valence Force Field*, que representa interações de curto alcance, onde apenas vizinhos próximos contribuem de forma relevante para o cálculo. [6]

Na simulação das propriedades vibracionais obtivemos o espectro de fônons na chamada curva de dispersão de fônons e a densidade de estados vibracionais. Isso é feito através Teoria Clássica do Cristal Harmônico e da aproximação adiabática (aproximação de Born-Oppenheimer) que implica no desacoplamento da parte nuclear e da parte eletrônica. [7]

Da mesma forma que na simulação eletrônica, a simulação vibracional foi realizada para 2 átomos de Si na base, 16 átomos de Si e para 15 átomos de Si mais uma impureza.

Tanto para a análise eletrônica, quanto para a análise vibracional, foi utilizado como impureza o elemento oxigênio, de configuração eletrônica $1s^2 2s^2 2p^4$.

Nas duas simulações, os cálculos foram realizados dentro da primeira zona de Brillouin, onde são escolhidos pontos de alta simetria.

Resultados e Discussão

Primeiramente foi obtida densidade de estados eletrônica para 2 átomos de Si na base (Figura 1), onde verifica-se que em torno das energias de 0 eV à 0.5 eV não há ocupação de elétrons, logo pode-se dizer que nesta região há um *gap* de energia, este valor concorda com certa aproximação dos valores experimentais.

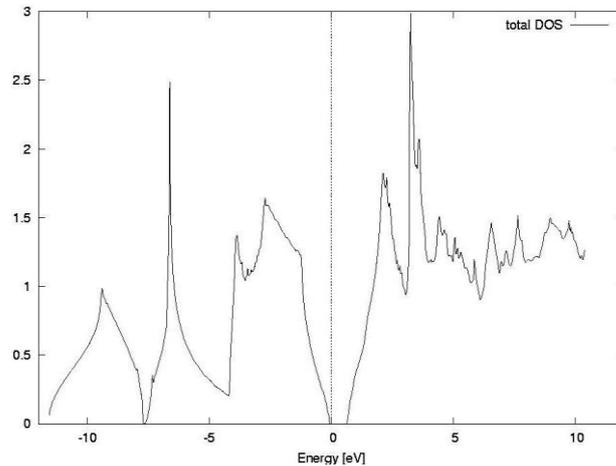


Figura 1: Densidade de estados eletrônica para 2 átomos de Si.

A partir da célula com 2 átomos foi construída uma supercélula com 16 átomos de Si (Figura 2). O objetivo do cálculo foi encontrar os melhores parâmetros de expansão no cálculo eletrônico que reproduzissem os resultados anteriores e que fossem compatíveis com a capacidade computacional disponível. A Figura 2 mostra que os parâmetros utilizados reproduzem com boa aproximação o comportamento da densidade de estados da Figura 1.

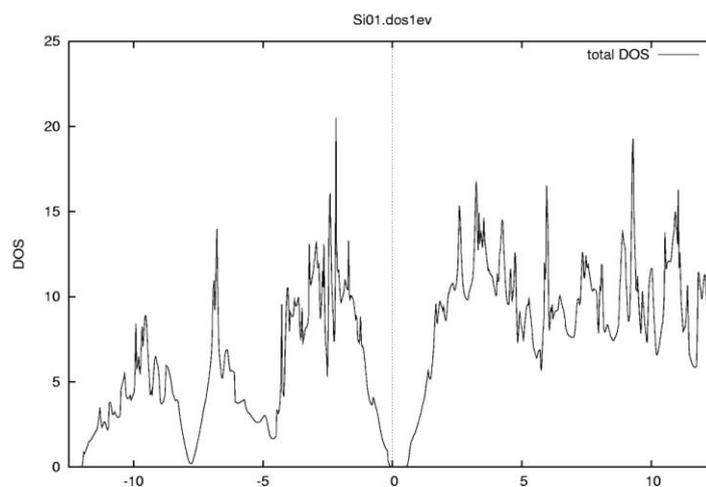


Figura 1: Densidade de estados eletrônica para 16 átomos de Si.

Com os mesmos parâmetros foi feito o cálculo para a mesma estrutura, porém considerando 15 átomos de Si com uma impureza substitucional de oxigênio (Figura 3).

O resultado numérico mostra que a presença da impureza gera fortes mudanças nas características eletrônicas, indicando uma forte interação com seus vizinhos.

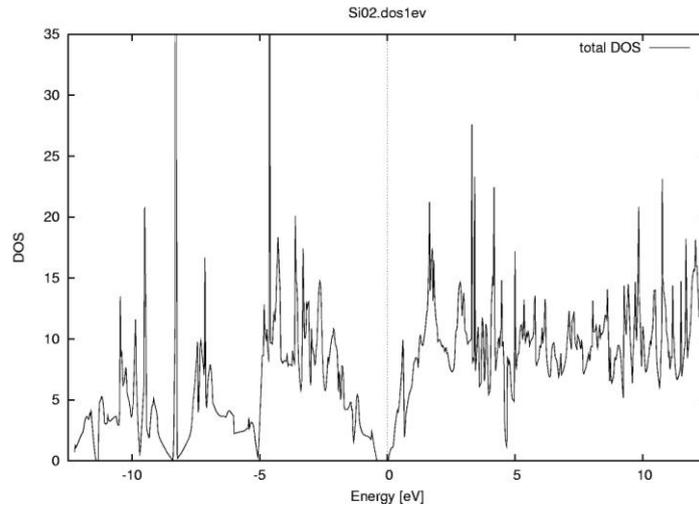


Figura 3: Densidade de estados eletrônica para 16 átomos de Si.

A curva de dispersão de fônons obtida para o silício *bulk* com apenas dois átomos (Figura 5a) mostra resultados de acordo com a literatura. A degenerescência que ocorre nos ramos ópticos no ponto Gama vem da ligação covalente entre os átomos. Também se observa uma maior quantidade de estados vibracionais na região 500cm^{-1} .

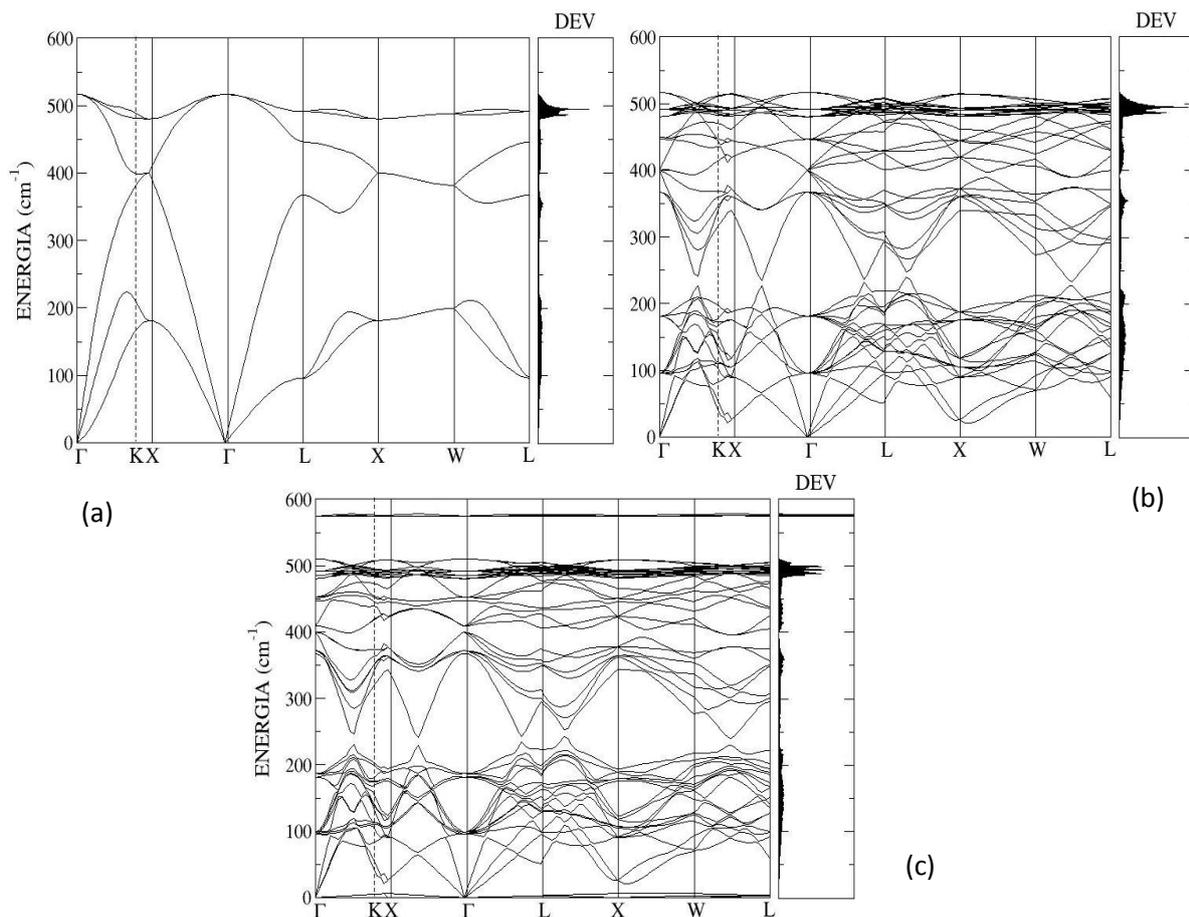


Figura 2: Dispersão de fônons e densidade de estados vibracionais do Si cúbico bulk e com impureza.

Na Figura 5, comparando (a) com (b), observamos que o comportamento da densidade de estados vibracionais é o mesmo para as duas, isto porque o aumento do número de átomos no sistema não deve alterar o comportamento da densidade de estados do mesmo. A diferença na curva de dispersão é devido ao aumento do número de modos vibracionais.

A dispersão de fônons e a densidade de estados vibracionais obtidos para os 15 átomos de Si mais uma impureza de oxigênio mostram que há um desdobramento dos níveis de energia, que está mais evidente nas direções $\Gamma K X \Gamma$. Pode-se observar também a presença de 3 modos vibracionais localizados na região acima dos ramos ópticos. Desta forma, a pequena alteração na densidade de estados referentes aos ramos ópticos provenientes se deve a deslocamento destes modos.

Agradecimentos

À Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul pelo fornecimento da bolsa PIBIC/UEMS, e à UFGD pela oportunidade de apresentação do trabalho.

Referências

- [1] Kittel, C. 1996. **Introduction to Solid State Physics**. John Wiley & Sons Inc.
- [2] Enderlein, R. e Horing, N. J. M. 1997. **Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices**. World Scientific.
- [3] Valentin,A; Sée, J; Galdin-Retailleau,S & Dollfus,P. Phonon dispersion in silicon nanocrystals. **Journal of Physics**, Series 92 (2007).
- [4] Pesola,M; von Boehm ; & Nieminen; R. M. 1999. Vibrations of the Interstitial Oxygen Pairs in Silicon. **Physical Review Letters**, v.82, n.20.
- [5] Blaha ,P; Schwarz, K & Luitz, J. 2000 **Wien97**. Getreidemarkt 9/156.
- [6] Santos, A. M. 2004. **Propriedades vibracionais dos nitretos do grupo III e de suas ligas**. Tese (Doutorado em ciências) - Universidade de São Paulo.
- [7] Bouchard, A.M; et.all. 1988.Vibrational properties of amorphous silicon-germanium alloys and superlattices. **Physical Review B**, v.38, n.15.