

DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS SEMI-EMPÍRICOS NA DESCRIÇÃO DOS PROCESSOS VIBRACIONAIS DOS SEMICONDUTORES

¹MACHADO, N. G. P. (noegabrielm@gmail.com); ²SANTOS, A. M. (adrianosnts2@gmail.com)

¹ Aluno do curso de Engenharia Física-UEMS; ² Professor do curso do curso de Engenharia Física-UEMS.

O crescimento epitaxial de filmes finos de ligas ternárias e quaternárias abre a possibilidade de manipular o gap de energia tornando possível a fabricação de heteroestruturas necessárias para a produção de LEDs e lasers. A física de fônons representa uma área da física do estado sólido de base teórica bem fundamentada, possibilitando assim a descrição das propriedades vibracionais de uma determinada estrutura. O estudo das propriedades vibracionais dos semicondutores permite obter ou prever informações sobre o sistema que está sendo estudado. A Teoria Clássica do Cristal Harmônico permite a descrição do comportamento vibracional de estruturas cristalinas a partir do conhecimento da matriz dinâmica. Para uma descrição mais aprimorada do fenômeno físico torna-se necessário descrever a energia potencial de interação em função de interações de longo alcance (l.a.) e de curto alcance (c.a), que representam as ligações eletrônicas e iônicas, respectivamente. Tal teoria, juntamente com métodos como o Valence Force Field, que representa a interação l.a., e a Soma de Ewald, que representa a interação c.a., permitem a determinação da matriz dinâmica, estabelecendo assim, o comportamento vibracional dos semicondutores. O uso deste método semi-empírico permite calcular o comportamento vibracional de materiais e também prever o comportamento vibracional de suas ligas ternárias e quaternárias. Portanto, o objetivo deste trabalho é simular computacionalmente e analisar o espectro vibracional dos seguintes materiais: Ba, Ca, Sr, Ta, Fe, GaSb, InP, CdTe, CdSe, CdS, AlSb, ZnSe, ZnS e InSb.

Palavra-chave: Física do Estado Sólido, Estrutura Cristalina, Espectro Vibracional, VFF.

Agradecimentos: à UEMS pela possibilidade desenvolver novas pesquisas e conhecimentos e à FUNDECT pela concessão da bolsa PIBIC.