

ESTUDO DO COMPORTAMENTO ELETRÔNICO E VIBRACIONAL DO SI WURTZITA DOPADO

Alessandro de Figueiredo Vierma¹; Adriano Manoel dos Santos²

¹Estudante do Curso de Física da UEMS, Unidade Universitária de Dourados ; e-mail: alessandrofvierma@gmail.com

²Professor(a) do curso de Física da UEMS, Unidade Universitária de Dourados; e-mail: adriano@uems.br

Física da Matéria Condensada

Resumo

O silício é o semicondutor de maior aplicação tecnológica deste século. Como ele é abundante e mantém suas características mesmo a altas temperaturas, as pesquisas e desenvolvimento de dispositivos eletrônicos levam ao estudo da possibilidade de integração do mesmo à outros materiais. Para estudar o silício wurtzita “bulk” e o silício dopado, realizamos uma simulação computacional dos processos vibracionais e eletrônicos, com o intuito de verificar a influência de uma impureza de oxigênio nas propriedades eletrônicas e vibracionais da estrutura cristalina.

Palavras-chave: Silício Wurtzita, Caracterização de Materiais, Cálculo Eletrônico e Vibracional.

Introdução

O silício (Si) é um sólido covalente, com uma estrutura do tipo diamante, com um lacuna de aproximadamente 1 eV de largura. O silício também apresenta características parecidas com o carbono, como a hibridização dos orbitais da camada de valência.

O silício é largamente empregado como material semicondutor por manter suas características mesmo a altas temperaturas. Apesar de seu polimorfismo, a estrutura mais comum do silício em um cristal é a estrutura cúbica de face centrada.

Devido aos vários estudos realizados, as propriedades eletrônicas e vibracionais do silício diamante *bulk* são bem determinadas.

O polimorfismo de silício tem atraído atenção por mais de 30 anos e inúmeras experiências foram realizadas durante este período. Kobliska e Solin são os pioneiros no trabalho com polítipos de estrutura cúbica hexagonal de silício, também denominada como lonsdaleite ou silício wurtzita. O silício wurtzita (Si-w) aparece naturalmente como micro cristais em Si amorfo, porém é pouco estudado por medidas de espectroscopia, devido à dificuldade em sua obtenção. Até recentemente não havia dados experimentais disponíveis sobre Si-w que confirmasse resultados teóricos das propriedades ópticas, tais como transmissão e índice de refração óptica.

A fase estável do Si-w também tem sido obtida no crescimento de filmes finos. Sua identificação por difração eletrônica tem sido confirmada pela micro-espectroscopia Raman. A deposição de filmes de silício hexagonal pode conduzir a novos dispositivos opto – eletrônicos.

A semelhança microscópica na distribuição atômica se reflete em uma similaridade nas propriedades eletrônicas e vibracionais entre o silício diamante e o wurtzita.

Tivemos como **objetivo** simular as propriedades vibracionais e eletrônicas do Si-w, utilizando respectivamente um software desenvolvido pelo orientador do projeto e, o pacote de simulações computacionais *wien97*.

Materiais e Métodos

Neste estudo foram utilizados livros textos, artigos, teses e computador do “Laboratório de Simulação de Materiais” (UEMS/DOURADOS).

Para simular as propriedades vibracionais do silício wurtzita, utilizamos um software desenvolvido pelo orientador do projeto na qual é baseado no método semi-empírico denominado *Valence Force Field*.

Na caracterização das propriedades eletrônicas usamos o pacote de simulação computacional *Wien97* que é baseado na teoria do funcional de densidades (DFT).

Resultados e Discussão

Para efeito de determinação dos melhores parâmetros na descrição da expansão necessária no cálculo da estrutura eletrônica para simular uma supercélula com 32 átomos, realizamos inicialmente o cálculo com 4 átomos. Os cálculos foram realizados a partir dos dados experimentais do parâmetro de rede da estrutura fcc, e da razão ideal entre os parâmetros de rede c e a .

Segue se os resultados do cálculo da densidade de estados do Si-w.

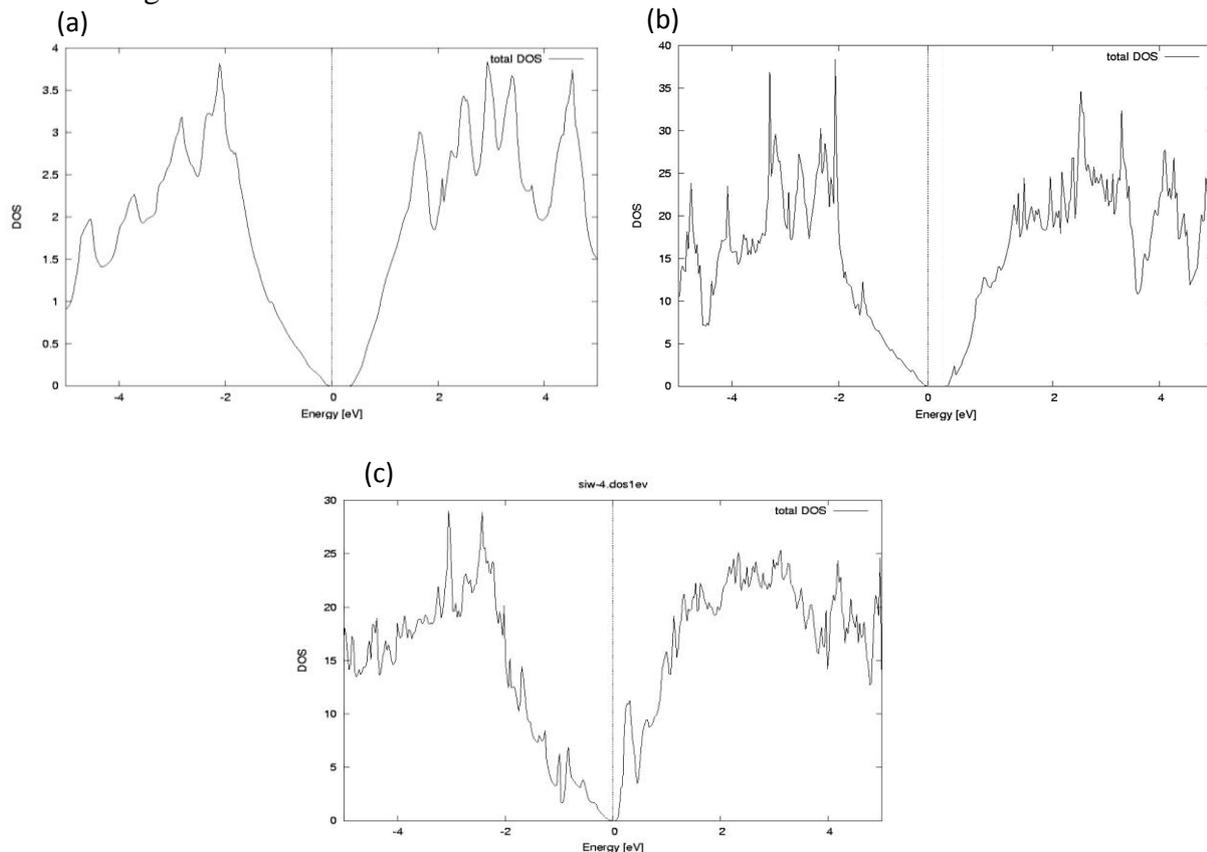


Figura 1 – Densidade de estados eletrônicos. (a) Si-w simulado com 4 átomos, (b) Si-w simulado com 32 átomos e (c) Si-w simulado com 31 átomos e uma impureza de oxigênio.

Os gráficos da Figura 1 representam a densidade de estados para a estrutura wurtzita simulada com 4 átomos de silício (a), com 32 átomos de silício e com 31 átomos de silício e uma impureza substitucional. Nestes gráficos vemos que a supercélula com 32 átomos reproduz com boa aproximação os resultados da célula primitiva com 4 átomos, indicando a utilização de bons parâmetros de simulação para propriedades eletrônicas. Na simulação com uma impureza substitucional de oxigênio verificamos uma forte influência do oxigênio nos estados eletrônicos, alterando não somente a densidade de estados como também a lacuna de energia. Este resultado indica que para simular uma impureza de oxigênio é necessário incluir um maior número de átomos.

Os gráficos seguintes são resultantes das simulações realizadas com um software desenvolvido pelo orientador do projeto o qual tem a capacidade de nos fornecer entre outros dados a curva de dispersão e a densidade de estados vibracionais (DEV). Simulamos os processos vibracionais do silício por meio do ajuste aos dados teóricos, possibilitando a determinação das constantes de força presentes no modelo de Feenstra, baseado segundo as concepções do *Valence Force Field*.

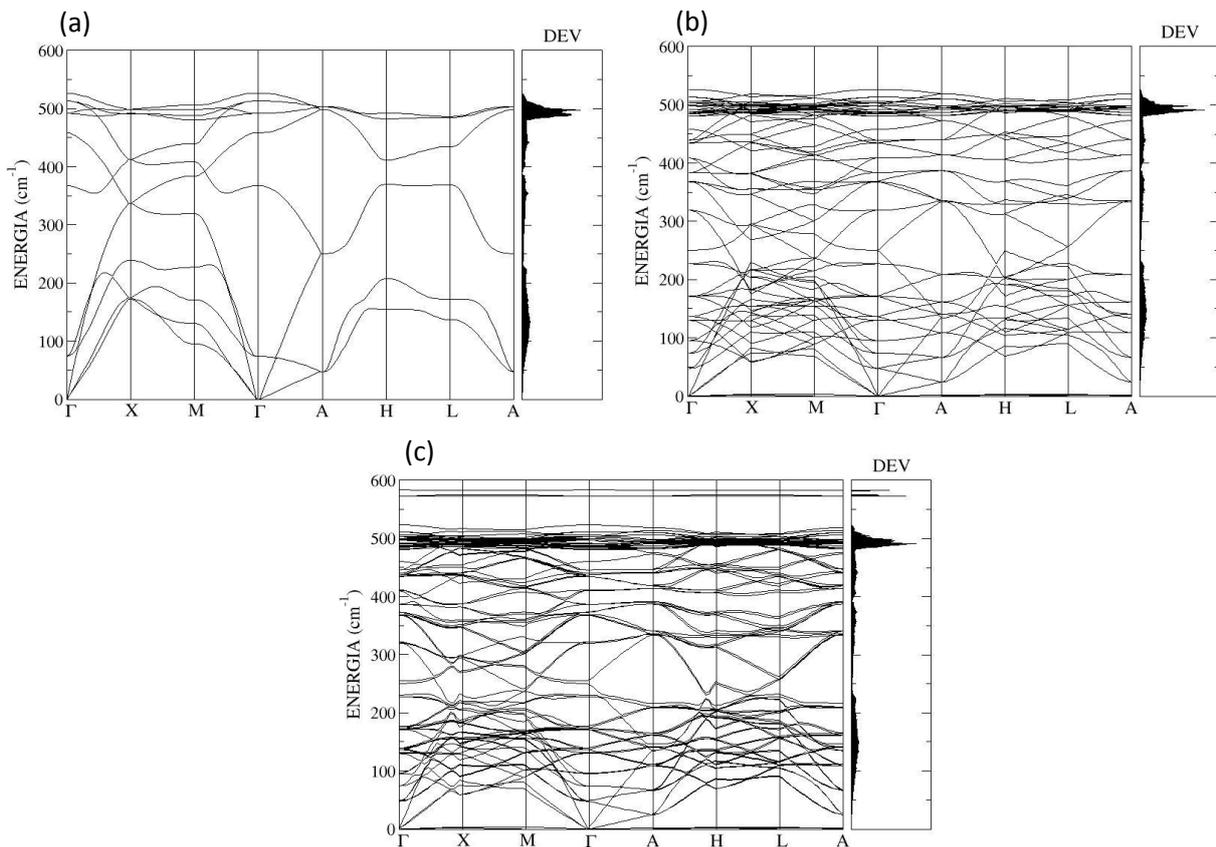


Figura 2 – Densidade de estados vibracionais. (a) Si-w simulado com 4 átomos, (b) Si-w simulado com 32 átomos e (c) Si-w simulado com 31 átomos e uma impureza de oxigênio.

Na Figura 2 os gráficos se referem a curva de dispersão e densidade de estados vibracionais do silício wurtzita. O gráfico (a) foi gerado na simulação com 4 átomos de silício, (b) na simulação com 32 átomos de silício e o gráfico (c) representa o resultado da simulação do Si-w dopado com uma impureza substitucional de oxigênio.

Pela análise dos gráficos (a), (b) e (c) da Figura 2 verificamos que a densidade de estados, em ambos os casos é maior na região dos ramos ópticos. Os valores obtidos para as energias no ponto gama, para o Si-w, são próximos dos valores experimentais, porém os resultados teóricos mostram que o desdobramento no nível de energia mais alto é resultante do incremento da interação com um único átomo como terceiro vizinho.

O gráfico (c) mostra desdobramentos nos níveis de energia, que não estão presentes em (b), juntamente com o aparecimento de uma lacuna vibracional localizado acima dos ramos ópticos. Este nível triplamente degenerado surge associado à presença da impureza e promove uma redução nos estados de energia dos ramos ópticos.

Agradecimentos

À Universidade Estadual de Mato grosso do Sul, pela concessão da bolsa de iniciação científica PIBIC/UEMS.

Referências

- Bandet, J; Despax, B; Caumont, M. 2002. Vibrational and electronic properties of stabilized wurtzite-like silicon, **JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED PHYSICS**. n 35, p. 234–239.
- Eisberg, R; Resnick, R. 1988. FÍSICA QUÂNTICA: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. **Sólidos- Condutores e Semicondutores**. Rio de Janeiro- RJ, Ed. Campus, p. 561–606.
- Joannopoulos, J. D; Cohen, M. L. 1973. Electronic Properties of Complex Crystalline and Amorphous Phases of Ge and Si. I. Density of States and Band Structures. **Physical Review**.
- K. Uma Mahendra Kumar; M. Ghanashyam Krishna. 2008. Chromium-Induced Nanocrystallization of a-Si Thin Films into the Wurtzite Structure. **Journal of Nanomaterials**, V. 2008, Article ID 736534, p. 1– 6.
- LIMA, A. F. 2007. **Estudo Teórico das Propriedades Eletrônicas e Ópticas do Espodumênio Natural (LiAlSi₂O₆)**. Tese (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Sergipe.
- Miguel, A. L. Marques; Silvana Botti. 2006. O que é e para que serve a Teoria dos Funcionais da Densidade?. **Gazeta de Física – Sociedade Portuguesa de Física**, p. 10– 15.
- SANTOS, A. M. 2004. **Propriedades Vibracionais dos Nitretos do Grupo III e de suas Ligas**. Tese (Doutorado em Ciências) – Universidade de São Paulo.
- VIERMA, A. F. 2009. **Calculo das Propriedades Vibracionais do Si**. Relatório IC – Universidade Estadual de Mato Grosso do sul.