

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Materiais nanoestruturados do tipo IV e III-V dopados com Mn

Jeverson Teodoro Arantes Junior

Orientador: Adalberto Fazzio

Tese apresentada junto ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Adalberto Fazzio	(IF-USP)
Prof. Dr. Euclides Marega Junior	(IF-USPSC)
Prof. Dra. Marília Junqueira Caldas	(IF-USP)
Prof. Dr. Raimundo R. dos Santos	(IF-UFRJ)
Prof. Dr. Roberto Hiroki Miwa	(IF-UFU)

São Paulo, SP, Brasil
2007

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Arantes Junior, Jeverson Teodoro

Materiais nanoestruturados do tipo IV e III-V dopados com Mn. São Paulo, 2007.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Depto. Física de Materiais e Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Adalberto Fazzio

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Semicondutores; 2. Materiais nanoestruturados; 3. Impurezas; 4. Primeiros princípios.

USP/IF/SBI-080/2007

Dedico esta tese

A meus filhos João Lucas e Ana Luísa

A minha esposa Adrienne Marlise Mendes Brito.

*A meus pais e irmãos, pelo total apoio e por
sempre incentivar-me na busca de
meus objetivos.*

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Adalberto Fazzio pelo incentivo, pelas discussões sobre o trabalho e pelos longos churrascos em sua casa. Não poderia deixar de agradecê-lo por vários ensinamentos que em muito superam a orientação e que, sem dúvida serão úteis em minha vida.

Ao prof. Antônio José Roque pelos ensinamentos, pela amizade e pela disponibilidade.

Aos professores Gustavo M. Dalpian, Tomé M. Schmidt, Pedro P. Venezuela e Alex Antonelli pela colaboração.

Aos colegas e amigos do Instituto de Física da USP, pela acolhida e amizade, em especial à Luana por ter feito uma leitura rápida da tese e me ajudado em algumas correções.

Aos funcionários do Instituto de Física da USP, que me auxiliaram nos processos burocráticos, em especial à Marisa.

À FAPESP pelo apoio financeiro durante a realização desse trabalho.

Ao CENAPAD-Campinas pelo suporte computacional.

Enfim, a todos que de alguma forma contribuíram para a realização desse trabalho.

RESUMO

No presente trabalho, investigamos propriedades eletrônicas, estruturais e de transporte de nanoestruturas do tipo IV e tipo III-V usando cálculos de primeiros princípios.

(I) Como ponto de partida, verificamos sistematicamente a estabilidade do Mn substitucional nas camadas de Ge em uma heteroestrutura de Si/Ge. Estudamos a interação magnética Mn-Mn relativa a variação do parâmetro de rede do substrato, indicando uma mudança na diferença de energia entre as configurações de alto e baixo *spin*. Para um substrato com parâmetro de rede igual ao do Si, esta diferença de energia favorece a configuração de baixo *spin*, entretanto com o aumento do parâmetro de rede a configuração com alto *spin* passa a ser a mais estável.

(II) No estudo de nanofios de Ge, crescidos nas direções [110] e [111], verificamos a dependência do *gap* de energia em relação ao diâmetro do mesmo. Estudamos a reconstrução da superfície (001) para alguns diâmetros de nanofios crescidos na direção [110]. Fizemos um estudo sistemático da dopagem de Mn em nanofios de Ge para verificar quais os sítios mais estáveis para a impureza. Investigamos, também, o acoplamento magnético Mn-Mn ao longo da direção de crescimento do fio e radialmente ao mesmo, para diferentes distâncias entre os dopantes.

(III) A observação de partículas de ouro na superfície dos nanofios, vindas da gota de Au utilizada como catalizador no processo de crescimento dos fios, serviu como motivação para o estudo da energia de formação do mesmo em diferentes posições e concentrações nos nanofios. Esses resultados possibilitaram-nos o entendimento de como o Au se difunde nos nanofios, se através da superfície ou pelo interior do fio em situações com maiores e menores concentrações do metal.

(IV) Verificamos o comportamento da dopagem tipo-*n* e tipo-*p* nas propriedades de transporte eletrônico para as impurezas na região central e na superfície (001) de nanofios de Ge. Devido a importância da superfície em nanoestruturas, calculamos a variação da transmitância eletrônica na presença de ligações incompletas conjuntamente com a adsorção de uma molécula de OH.

(V) Investigamos como o confinamento quântico altera o comportamento de defeitos nativos tipo vacâncias em nanofios de Si. Através da energia de formação para diferentes sítios não equivalentes, verificamos um possível caminho de migração da vacância para a superfície (001). Calculamos o valor da barreira de migração das regiões centrais para a superfície (001) do nanofio assim como o valor do U-efetivo que no *bulk* é negativo.

(VI) Finalmente, realizamos um estudo sistemático de nanofios de materiais III-V (InP e GaAs) e nanopartículas de InAs dopadas com Mn. Verificamos as posições de equilíbrio e a possibilidade de uma ordem magnética para as impurezas na nanoestrutura. Para as nanopartículas, à medida que o sistema é confinado, ocorre uma maior localização dos estados de buraco e conseqüentemente uma diminuição na diferença de energia entre as configurações com alto e baixo *spin*, favorável ao alto *spin*. Através da inserção de “buracos” podemos aumentar essa diferença de energia.

ABSTRACT

In the present work, we investigate electronic, structural and transport properties of semiconductor nanostructures of type IV and III-V using first principles calculations.

(I) As a starting point, we verify systematically the stability of substitutional Mn in Ge layers in Si/Ge heterostructures. We study the Mn-Mn magnetic interaction as a function of the lattice parameter of the substrate, and we find that the energy difference between the high and low spin configurations changes as the lattice parameter is modified. Using Si as a substrate, that energy difference favors the low spin configuration, whereas increasing the substrate lattice parameter the high spin configuration becomes more stable.

(II) In the study of Ge nanowires, grown along the [110] and [111] directions, we investigate the variation of the energy gap as a function of the nanowire diameter. We study the (001) surface reconstruction for some nanowire diameters grown along the [110] direction. We did a systematic study of Mn doping in the Ge nanowires in order to verify which are the most stable substitutional sites. We also study the Mn-Mn magnetic coupling for their separation parallel to the growth direction as well as perpendicular to it. This study was performed for different distances between the impurities.

(III) The gold particles observed in the top surface of the nanowires, a result of the Au droplet used as catalyst in the growth process, was the motivation of the study of the formation energy of Au isolated impurities in different positions and concentrations in the nanowires. These results make it possible to know if the Au atoms will move either along the surface or towards the bulk of the wire.

(IV) We verify the behavior of the type-n and type-p doping in the electronic transmission properties for impurities positioned either in the central or in the (001) surface of Ge nanowires. Because of the importance of the surface in nanostructures, we calculate the changes in the electronic transmittance in the presence of a dangling bond and an OH molecule adsorbed in the surface.

(V) We investigate how the quantum confinement modifies the behavior of the vacancy native defect in Si nanowires. From the formation energy difference for non-equivalent sites, we verify one possible pathway for the vacancy migration towards the (001) surface, and we calculate the migration barrier from the central region to the nanowire surface. We also calculate the effective-U, and find it to be negative in the bulk region.

(VI) Finally, we also made a systematic study of nanowires of type III-V (InP and GaAs) as well as InAs nanoparticles doped with Mn. We study the equilibrium positions and the possibility of a magnetic order for the impurity in these nanostructures. For the nanoparticles, when the system is more confined the hole becomes more localized and, consequently, the energy difference between the high and low spin configuration still favors the high spin but becomes smaller. When we insert holes we can increase this energy difference.

Gracias por visitar este Libro Electrónico

Puedes leer la versión completa de este libro electrónico en diferentes formatos:

- HTML(Gratis / Disponible a todos los usuarios)
- PDF / TXT(Disponible a miembros V.I.P. Los miembros con una membresía básica pueden acceder hasta 5 libros electrónicos en formato PDF/TXT durante el mes.)
- Epub y Mobipocket (Exclusivos para miembros V.I.P.)

Para descargar este libro completo, tan solo seleccione el formato deseado, abajo:

