

# POTENCIALES DE DEFORMACION HIDROSTATICOS EN SEMICONDUCTORES DE COORDINACION TETRAEDRICA

## CALCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS

E. L. Peltzer y Blanca y R. A. Casali  
*Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos*  
59 N° 789, CC 565, 1900 La Plata

En el presente trabajo se realiza una determinación de los potenciales de deformación a partir de cálculos de primeros principios mediante la utilización de la aproximación local de la Funcional de la Densidad y de pseudopotenciales, para materiales semiconductores del tipo IV y III-V.

### INTRODUCCION

La determinación de las propiedades electrónicas en semiconductores bajo presión hidrostática se ha realizado tanto en forma experimental como teórica. La dificultad experimental para alcanzar muy altas presiones ha sido subsanada con la utilización de las celdas de diamante (Diamond Anvil Cell, DAC), que ha permitido obtener presiones de hasta 20 GPa, mientras que en los cálculos teóricos esta limitación no existe.

A partir de cálculos ab-initio y mediante el uso de la funcional densidad y pseudopotenciales, es posible determinar, en un esquema autoconsistente, las propiedades estructurales de un sólido en sus distintas fases con alta precisión. En tal sentido, y utilizando una modificación del teorema del virial, es posible calcular las propiedades electrónicas, estructurales y dinámicas bajo presión hidrostática partiendo de cálculos de primeros principios, y confrontarlos con valores experimentales, obteniéndose excelentes resultados.

En este trabajo se hace un estudio de los potenciales de deformación basándose en el esquema de cálculo arriba mencionado. Los materiales que se estudian son semiconductores tipo IV y III-V.

Se puede definir el potencial de deformación hidrostático o volumétrico para un dado estado X como:

$$V_d(X) = \partial E(X) / \partial \ln V$$

donde  $E(X)$  es la energía del Estado X (siendo X un punto arbitrario de la estructura de banda) y  $V$  es el volumen del semiconductor<sup>1</sup>. Se han realizado en años pasados numerosos trabajos sobre potenciales de deformación mediante la utilización de tensiones uniaxiales<sup>2</sup>. Se presenta aquí una forma diferente de cálculo de estos potenciales, mediante presiones hidrostáticas.

Una determinación teórica de  $V_d$  es particularmente importante debido a la gran dispersión de los valores experimentales existentes.

La importancia del conocimiento de tales potenciales es por su relación con fenómenos físicos inherentes a la estructura del sólido, tales como interacción electrón-fonón, determinación de la conductividad dc en semiconductores dopados, cambios en la constante de red inducidos por dopaje, etc.

La determinación de los autovalores  $E(X)$  mediante la utilización de los pseudopotenciales ab-initio lleva consigo, debido al método de generación, la contribución proveniente del potencial de intercambio y correlación. En el formalismo utilizado<sup>3</sup> se debe extraer del cálculo este potencial para obtener el potencial de deformación.

### CALCULOS REALIZADOS

En base a cálculos realizados sobre compuestos tales como GaP y GaAs o elementos como Ge y Si se determinan los potenciales de deformación. Como hemos dicho anteriormente, existe una gran dispersión en los resultados tanto experimentales como teóricos. Recientes cálculos realizados<sup>1</sup> con LMTO (Linear Muffin-Tin Orbitals), producen resultados, que con respecto a los valores obtenidos en el presente trabajo, como se pueden ver en la tabla I, tienen errores de la misma magnitud.

### CONCLUSIONES

Si bien se puede decir que en los cálculos realizados en el presente trabajo, existen diferencias con respecto a los valores experimentales, debe remarcar que el potencial de deformación obtenido para el Si, único elemento convergido, se encuentra en excelente concordancia con los valores experimentales, por tanto, se podría predecir que con energías de corte más elevadas (las usadas en este

trabajo son de aprox. 14Ry) en los cálculos para el Ge, GaP y GaAs los valores del potencial de deformación mejorarán sensiblemente, convalidando el uso de este tipo de cálculo para el presente problema.

Debe destacarse también, que existe una gran dispersión en cuanto a los valores experimentales, por tanto habría que sugerir nuevas determinaciones que unifiquen estos resultados.

#### REFERENCIAS

	Si	Ge	GaP	GaAs
Valores	-4.6 <sup>4</sup>	0. <sup>4</sup>	-10.6 <sup>6</sup>	-7.7 <sup>7</sup>
Experim.	-8.6 <sup>5</sup>	-3.3 <sup>5</sup>		
	-9.0 <sup>5</sup>	-6.9 <sup>5</sup>		
Pres. (a)	-7.03	-9.19	-8.87	-9.63
Trab. (b)	3.20	3.08	3.28	3.16
(c)	-10.23	-12.27	-12.15	-12.79
Otros Calc.	-7.9 <sup>1</sup>	-8.2 <sup>1</sup>		-6.3 <sup>5</sup>

- a) potenciales de deformación
- b) corrección debida pot. intercambio y correlación
- c) potencial de deformación sin corregir

**Tabla 1: potenciales de deformación teóricos y experimentales en el tope de banda de valencia.**

1. J. A. Vergés, D. Glotzel, M. Cardona and O. K. Andersen. Phys. Stat. Sol. (b) 113, 519 (1982).
2. O. H. Nielsen. Phys. Rev. B15, 34, 5808 (1986) y referencias allí mencionadas.
3. C. O. Rodríguez, R. A. Casali, E. L. Peltzer y Blancá y O. M. Cappannini. Phys. Stat. Sol. (b) 143, 539 (1987).
4. L. Pintschovius, M. Cardona and J. A. Vergés. J. Physique 42, c-634 (1981).
5. D. L. Rode in Semiconductors and Semimetals Ed. R. K. Willardson and A. C. Beer, Academic Press, Inc. 1975.
6. S. Kocsis. Phys. Stat. Sol. (a) 28, 133 (1975).
7. H. J. Lee, J. Basinski, L. Y. Juravel and J. C. Wooley. Canad. J. Phys. 57, 419 (1978).
8. T. C. Collins, D. J. Stukel and R. N. Euwema. Phys. Rev. B1, 724 (1970).

