



***Rafael L. Leonel¹ (PG), Horácio W. L. Alves² (PQ)**

¹ rafaelleonel300@gmail.com

¹² Universidade Federal de São João del Rei, DCNat, São João del-Rei, Brasil

RESUMO

Este trabalho investiga as propriedades estruturais e eletrônicas de nanofios de Nitreto de Índio (InN) nas fases Wurtzita e Zinblende, com foco em diferentes orientações de crescimento: [0001], [111] e [100]. A partir de cálculos baseados em DFTB, avaliamos a estabilidade estrutural, energia de formação e características de banda dos nanofios em diferentes configurações. Os resultados mostram que a fase Wurtzita apresenta bom comportamento estrutural e convergência gradual do bandgap para o valor de bulk. Em contrapartida, a orientação [111] da fase Zinblende revelou-se estruturalmente instável, com ligações deformadas e deslocamento de átomos da região central para a superfície. A mudança para a direção [100] restaurou a simetria cúbica e permitiu a obtenção de bandas de energia e energia de formação bem comportadas.

Palavras-chave: Nanofios, Nitreto de Índio, DFTB

Introdução

O Nitreto de Índio (InN) é um semicondutor do grupo III-N com elevado interesse científico e tecnológico devido ao seu estreito bandgap ($\sim 0,7$ eV) e elevada mobilidade eletrônica, o que o torna promissor para aplicações em detectores infravermelhos, transistores de alta frequência e dispositivos optoeletrônicos em nanoescala [1]. Quando estruturado na forma de nanofios, o InN apresenta propriedades altamente anisotrópicas e sensíveis à sua fase cristalina, orientação de crescimento e raio, tornando fundamental a investigação de sua estabilidade estrutural e eletrônica sob diferentes condições.

Embora a fase mais estável do InN seja a Wurtzita, a possibilidade de crescimento em fase cúbica (Zinblende) tem sido explorada, principalmente pela sua compatibilidade com substratos como Si e GaAs. No entanto, a estabilidade dessa fase depende fortemente da direção de crescimento adotada, sendo que, em nanoestruturas, certos arranjos podem induzir fortes distorções atômicas que comprometem o desempenho eletrônico do material.

O presente estudo visa comparar o comportamento de nanofios de InN nas fases Wurtzita e Zinblende, nas direções [0001], [111] e [100], por meio de modelagem teórica, analisando sua viabilidade estrutural e potencial eletrônico.

Metodologia

Análise por DFTB.

As simulações foram realizadas utilizando o método DFTB (Density Functional based Tight Binding) [2], implementado no pacote DFTB+, com parametrizações específicas para nitretos III-N. O DFTB permite obter, com baixo custo computacional, boas estimativas da energia de formação, relaxações estruturais e estrutura de bandas eletrônicas, especialmente em sistemas de grande porte, como nanofios. As estruturas dos nanofios foram construídas com diferentes raios e orientações de crescimento — [0001] para a fase Wurtzita, e [111] e [100] para a fase Zinblende. Para cada configuração, as estruturas foram totalmente relaxadas até que as forças residuais se tornassem desprezíveis. O bandgap foi estimado a partir da diferença entre os estados de menor energia da banda de condução e os de maior energia da banda de valência ao longo do eixo axial do nanofio, e sua variação foi analisada em função do número total de átomos (fator de crescimento). A energia de formação foi calculada por par de átomos (ou por átomo, quando aplicável) com base na diferença entre a energia total do sistema e as energias de referência do In e N em seus estados fundamentais, normalizada pela quantidade de pares no sistema. Essa análise permitiu avaliar a estabilidade relativa entre as diferentes fases e orientações estudadas.



Resultados e Discussão

Os resultados mostram que os nanofios de InN na fase Wurtzita e orientação [0001] apresentam estabilidade estrutural e diminuição progressiva do bandgap com o aumento do número de átomos, aproximando-se do valor experimental de bulk ($\sim 0,7$ eV) [3]. As bandas eletrônicas mantêm o caráter direto, e as análises de DRX simulados indicam evolução cristalina com o crescimento radial.

Na fase Zinblende com orientação [111], no entanto, foram observadas fortes deformações estruturais, com deslocamentos significativos dos átomos centrais para a superfície e ângulos de ligação tendendo a 90° , o que compromete a simetria cúbica e a interpretação das bandas eletrônicas. Diante disso, adotou-se a orientação [100], que se mostrou estruturalmente mais estável. Os nanofios nessa configuração apresentaram bandas com dispersão bem definida ($\Gamma \rightarrow X$) e energia de formação decrescendo suavemente, além de manterem ângulos e ligações compatíveis com a estrutura cúbica ideal.

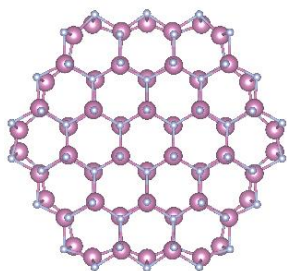


Figura 1: Nanofio de Nitreto de Índio de raio 9 Å [0001]

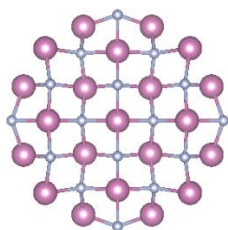


Figura 2: Nanofio de Nitreto de Índio de raio 6 Å [100]

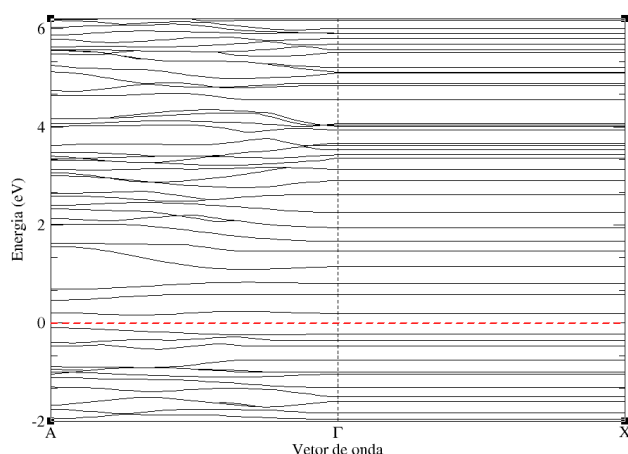


Figura 3: Banda de Valência, Banda de Condução e Bandgap para o Nanofio de Nitreto de Índio de raio 6 Å [100]

Conclusões

Este estudo demonstrou que a estabilidade estrutural dos nanofios de InN depende fortemente da orientação cristalina, sendo a fase Wurtzita ([0001]) estável e funcional, enquanto a fase Zinblende na orientação [111] apresentou distorções que comprometem sua viabilidade [4]. A orientação [100], por sua vez, revelou-se uma alternativa promissora para manter a simetria cúbica e obter bandas eletrônicas bem definidas. As análises de energia de formação, bandgap e ordem cristalina indicam que o controle da orientação de crescimento é crucial para a engenharia de propriedades em nanoestruturas de InN. Esses resultados oferecem diretrizes úteis para a fabricação racional de nanodispositivos semicondutores baseados em nitretos III-N.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo apoio financeiro, e ao FQMat e UFSJ pelo apoio institucional

Referências

- [1] International Roadmap For Devices and Systems, 2020 Edition, Executive Summary, IEEE.
- [2] B. Hourihane et al., J. Chem. Phys., vol. 152, 124101 (2020)
- [3] J. Wu, "When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives", *J. Appl. Phys.*, vol. 106, p. 011101, 2009.
- [4] T. Takeuchi et al., "Quantum-confined Stark effect due to piezoelectric fields in GaInN strained quantum wells", *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 36, pp. L382–L385, 1997.