

EXTRACCIÓN DE PSEUDOPOTENCIALES PARA PASIVAR NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

Mauricio Bandera De La Hoz

Resumen

Una de las mayores dificultades en el estudio teórico de la estructura electrónica de las nanoestructuras semiconductoras es el efecto de la superficie, debido al hecho que la mayoría de los enlaces asociados a la superficie están sin completar, estos enlaces libres normalmente introducen estados superficiales a la banda prohibida, influyendo en las propiedades de las nanoestructuras. La pasivación es un proceso mediante el cual se inactiva la superficie de un material, de tal manera que sus características no se vean afectadas por la interacción con el medio en el que el material se encuentre. Este es un proceso importante para el buen funcionamiento de los dispositivos tecnológicos, ya que a través de una buena pasivación se garantiza el buen funcionamiento de los dispositivos en diferentes condiciones ambientales.

Durante el proceso de pasivación, una especie atómica, que en el caso más simple sería un átomo de hidrógeno, se usa para completar los enlaces libres estabilizando la superficie del sistema y reduciendo su energía libre. La pasivación de una superficie ocasiona cambios en términos de la relajación y/o reconstrucción de la estructura atómica, que a la vez ocasiona cambios en la estructura electrónica del sistema. El control de estos cambios es fundamental para el diseño y fabricación de dispositivos tecnológicos que aprovechen las propiedades ópticas como la fluorescencia.

Desde un punto de vista teórico, el cálculo atomístico de nanoestructuras pasivadas sigue siendo difícil debido a la gran demanda computacional relacionada a las grandes cantidades de átomos de los sistemas y a la poca precisión que se tiene debido a su simetría esférica. Por tal motivo, utilizando el método de los pseudopotenciales empíricos (EPM) que nos ofrece un menor coste computacional y considerando una simetría no esférica de nuestros potenciales, obtuvimos pseudopotenciales confiables y altamente transferibles que consideran adecuadamente la pasivación de diferentes materiales (GaAs, AlAs, CdSe y Ge).

Además, resolvimos la ecuación de Schrödinger de una sola partícula con los pseudopotenciales de los pasivantes obtenidos para *slabs* de cada uno de los materiales, orientados en las direcciones cristalográficas [100], [110] y [111]. En todos los casos, la banda prohibida (E_g) se traza en función del tamaño de la muestra, mostrando una buena convergencia hacia los valores de las estructuras masivas (*bulk*). También calculamos el gap de energía para nanohilos de AlAs y GaAs y nanohilos *core/Shell* de GaAs/AlAs y AlAs/GaAs. Nuestros resultados muestran que, para una pasivación eficiente, es necesario incluir la simetría del momento cuadrupolar, además de la componente imaginaria del dipolo; de lo contrario, tendremos estados virtuales entre los estados CBM y VBM, que en su mayoría están localizados en la superficie.

Palabras claves: Pasivación, pseudopotenciales empíricos, nanoestructuras semiconductoras.