

Cristais de CdTe e CdSe: investigação das propriedades estruturais e eletrônicas utilizando métodos de primeiros princípios.

Roberta Diényffer Borges Moreira¹ e Regina Lelis-Sousa¹

1. Estudante de IC do Curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal do Tocantins – UFT, Campos de Araguaína, Unidade Cimba; Araguaína, TO; *rdienyffer@hotmail.com

2. Professora Pesquisadora do Curso de Licenciatura em Física da Universidade Federal do Tocantins – UFT, Campos de Araguaína, Unidade Cimba, Araguaína, TO.

Palavras Chave: dispositivos híbridos, semicondutores inorgânicos, estrutura eletrônica.

Introdução

A eletrônica orgânica tem despertado interesse da comunidade científica que se motiva pela possibilidade de construção fotovoltaicos, dispositivos emissores de luz de grande área, sensores flexíveis entre outros. Os materiais orgânicos utilizados como camada ativa se destacam porque, em geral, quando comparados aos semicondutores tradicionais, são mais fáceis de processar, têm baixo custo de produção, são quimicamente mais versáteis e permitem processos de engenharia de gaps. Apesar das qualidades destacadas, no tange aos dispositivos fotovoltaicos e emissores de luz, um dos desafios é a baixa eficiência de conversão de energia ou geração de luz, respectivamente. Atualmente, há um consenso de que a eficiência dos dispositivos pode ser aumentada quando se combina a camada orgânica com materiais inorgânicos que são utilizados como transportadores de elétrons. Além disso, muitas são as evidências de que os dispositivos híbridos têm melhor desempenho quando o semicondutor inorgânico é nanoestruturado, seja como pontos quânticos, nanofios, nanotubos, nanorods, Dentre os inorgânicos, o CdSe (seleneto de cádmio) e CdTe (telureto de cádmio), têm se destacado como camada transportadora de elétrons. Especificamente, a combinação de CdSe com P3HT (poli-3-hexil-tiofeno) [1, 2] possibilitou a produção de fotovoltaico [2] e também um fotodetector [3] com excelente desempenho. Ainda não está claro porque o CdSe é uma melhor opção quando comparado a TiO₂, ZnO ou outros óxidos metálicos comumente utilizados como camada transportadora de elétrons. Neste trabalho apresentamos uma investigação teórica detalhada das propriedades estruturais e eletrônicas dos cristais de CdTe e CdSe usando métodos de primeiros princípios. O objetivo do estudo é tentar correlacionar as propriedades destes sistemas na forma bulk com o bom desempenho como transportadores de elétrons nos dispositivos híbridos.

Resultados e Discussão

Dados experimentais mostram que os cristais de CdTe e o CdSe se cristalizam em 02 estruturas distintas: blenda (ZB) (ver Fig. 1) ou wurtzita (WZ). Em ambas as estruturas os átomos são tetracoordenados e o arranjo espacial é semelhante. Na figura 1, apresentamos a célula unitária para os materiais na estrutura ZB. Investigamos as propriedades estruturais e eletrônicas destes cristais utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT – Density Functional Theory) e energia de troca e correlação LDA (Local Density Approximation) com parametrização de Perdew e Zunger. Para diminuir o esforço computacional utilizamos pseudopotenciais ultrasuaves e funções de base do tipo ondas planas [5].

Após exaustivos testes de convergência, concluímos

que valores de energia de corte das ondas planas de 40 Ry e 50 Ry para o CdSe e o CdTe eram suficientes para

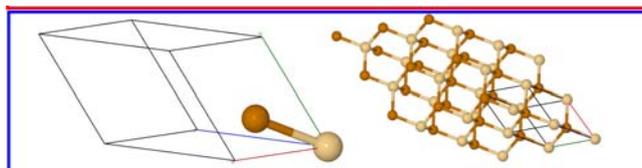


Figura 1. Célula unitária para o CdTe ou CdSe na estrutura Zinc Blend. À direita mostramos a translação de três células unitárias nas direções cristalográficas

obter resultados convergidos. A diferença relativa entre os parâmetros de rede calculados por nós e os dados experimentais [4] é menor que 1,2%, indicando excelente acordo. Dado que a geometria do sistema pode ser bem descrita por nossa metodologia, temos confiança nas propriedades eletrônicas calculadas. Nossos resultados para estrutura de bandas e densidade de estados evidenciam que tanto o CdTe quanto o CdSe são semicondutores de gap direto. Em ambos, o fundo da banda de condução e o topo da banda de valência estão localizados no ponto Gamma. Ressaltamos que o fundo da banda de condução é dominado pelo Cd (níveis s e p) com contribuição do Se e Te (níveis s e p). Os níveis d do Cd e do Se (ou Te) estão localizados a mais de 8 eV abaixo do topo da banda de valência.

Conclusões

Apresentamos um estudo detalhado das propriedades estruturais e eletrônicas dos cristais de CdTe e CdSe, empregando métodos de primeiros princípios baseado na DFT. Nossos resultados mostram que estes materiais são semicondutores de gap direto e que os estados eletrônicos da banda de condução são compostos majoritariamente por níveis s e p do Cd e Te (ou Se). Esta configuração eletrônica é diferente da encontrada em óxidos metálicos tradicionalmente utilizados para transporte de elétrons nos dispositivos híbridos e pode ser um indicativo do melhor desempenho do CdSe ou CdTe nos dispositivos mencionados anteriormente.

Agradecimentos

Agradecemos o suporte financeiro do CNPq, INEO e também os recursos computacionais do CENPAD-SP.

[1] S. Gunes e N. S. Sariciftci. *Inorg. Chim. Acta* **361**, 581 (2008).

[2] K. Kumari, S. Chand, V. D. Vankar e V. Kumar. *Appl. Phys. Lett.* **94**, 213503 (2009).

[3] X. Wang et al. *Adv. Funct. Mater.* **23** (2013).

[4] J. Zhou et al. *J. Phys. Chem. C* **117** (2013).

[5] GIANNOZZI, P. et al. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **21**, n. 39, (2009)