

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos

Semana Integrada do Instituto de Física  
de São Carlos

13<sup>a</sup> edição

Livro de Resumos

São Carlos  
2023

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos  
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)  
Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado  
por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.  
358p.

Texto em português.

1.Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

## PG99

# Efeitos do strain em nanofios politípicos

SIQUEIRA, Anderson Henrique<sup>1</sup>; SIPAHI, Guilherme Matos<sup>1</sup>

anderson.siqueira@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos – USP

Nanofios semicondutores de compostos III-V apresentam grande variedade de aplicações em dispositivos tecnológicos. O avanço das técnicas de crescimento dessas nanoestruturas, permite obter nanofios na fase zinblend ou wurtzita puros, como também é possível produzir nanofios onde essas duas fases coexistem. Essa coexistência dessas duas fases é denominada de politipismo, e tem grandes efeitos sobre as estruturas de bandas, devido ao confinamento dos portadores de carga. O politipismo das fases zinblend e wurtzita em nanofios de compostos III-V, está relacionado a parâmetros como o diâmetro do nanofio e a temperatura de crescimento dessa nanoestrutura. (1) A descrição realista das estruturas de bandas permite entender a influência do confinamento sobre os portadores de carga, e como isso afeta as propriedades ópticas e eletrônicas do sistema. Neste trabalho, o método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  será usado para construir o Hamiltoniano  $8 \times 8$  para as estruturas cristalinas zinblend e wurtzita. Partindo da formulação das funções envelope, construiremos o Hamiltoniano matricial para uma heteroestrutura no espaço direto, e expandindo as funções envelope em ondas planas, construiremos o Hamiltoniano para uma heteroestrutura no espaço recíproco. O politipismo acarreta em constantes de redes diferentes para as duas fases cristalinas, que tendem a se ajustar na interface politípica. (2) O principal objetivo deste trabalho é construir um modelo matemático que descreva como os parâmetros de rede das fases zinblend e wurtzita se ajustam na interface politípica. O *strain*, que resulta dessa interação dos átomos da fase zinblend e wurtzita na interface politípica, será aplicado em um poço quântico para investigar quais seus efeitos sobre as estruturas de bandas de um sistema politípico wurtzita/zinblend.

**Palavras-chave:** Nanofios. Politipismo. Strain.

**Agência de fomento:** CAPES (88887.803624/2023-00)

### Referências:

- 1 DICK, K. A. *et al.*. Control of iii-v nanowire crystal structure by growth parameter tuning. **Semiconductor Science and Technology**, v. 25, n. 2, p. 024009-1 - 024009-11, 2010.
- 2 ERTEKIN, E. *et al.*. Equilibrium limits of coherency in strained nanowire heterostructures. **Journal of Applied Physics**, v. 97, n. 11, p. 114325-1 - 114325-10, 2005.