

Cálculos de barreras de potencial en intercaras metal-semiconductor por métodos de primeros principios

Eduardo Menendez
Departamento de Física, Facultad de Ciencias
Universidad de Chile
eariel99@gmail.com

La estructura y las propiedades electrónica de las intercaras Au/CdSe son investigadas por medio de la Teoría del Funcional de la Densidad. Las intercaras estudiadas son paralelas a los planos (111) del Au y (0001) del CdSe en fase wurtzita. Las estructuras se optimizan por minimización de la energía y se calcula la barrera Schottky para cada modelo estructural. Tres de los cuatro modelos de superficie tienen altura de barrera en desacuerdo con los valores experimentales inferidos de las curvas I-C y C_V. Se discuten los posibles efectos de cuasipartícula y se plantea la pregunta ¿Se necesita un mayor nivel de teoría u otro modelo de superficie?