

**CALIDAD CRISTALINA EN FUNCIÓN DE LA  
CONCENTRACIÓN DEL MATERIAL TERNARIO  $Cd_{1-x}Zn_xTe$**

A. Gutiérrez<sup>1</sup>, M. E. Rodríguez<sup>2</sup> y J. Giraldo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Física de la Materia Condensada, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, A. A. 60739, Bogotá, D. C., Colombia

<sup>2</sup> Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada IF-UNAM, Campus Juriquilla, Querétaro, México

**RESUMEN**

Estudiamos la calidad cristalina del semiconductor ternario  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  como función de la concentración de zinc para bajos valores de  $x$  ( $0 < x < 0.14$ ) haciendo uso de un modelo computacional de crecimiento, en la dirección [100], imponiendo la restricción de no tener enlaces a primeros vecinos del tipo  $Cd-Cd$ ,  $Te-Te$  y  $Zn-Zn$ , basados en datos experimentales de espectroscopía micro-Raman. De acuerdo a la simulación computacional observamos que es posible tener cristales con la misma concentración de zinc, pero con calidad cristalina muy diferente. La calidad cristalina tiene una fuerte influencia en las propiedades estructurales de este material, debido a la distribución homogénea de los átomos de zinc en la red. Con nuestro modelo computacional podemos explicar la singularidad de las propiedades estructurales de este material que se evidencian de forma experimental.

**ABSTRACT**

The crystalline quality of the ternary semiconductor  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  has been studied as a function of the Zn concentration for low values of  $x$  ( $0 < x < 0.14$ ). According to experimental data of micro-Raman spectroscopy bounds of the type  $Cd-Cd$ ,  $Te-Te$  and  $Zn-Zn$  have not been taken into account. A computer simulation for the growth of the material has been employed. According to the simulations, it is possible to have crystals with the same zinc concentration but with very different crystalline quality. The crystalline quality has a strong influence on the structural properties of this material due to homogeneous distribution of zinc along the lattice. The singularity of the structural properties of this semiconductor material is satisfactorily explained by our computer model.

Durante los últimos años el  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ , un semiconductor ternario del grupo II-VI, ha recibido gran atención debido al alto coeficiente de absorción óptica, lo que lo hace un material prometedor para detectores de rayos  $X$  y  $\gamma$  para trabajar a temperatura ambiente. Por otro lado, el  $CdZnTe$  es considerado como uno de los mejores sustratos para el crecimiento heteroepitaxial de  $CdHgTe$ , el cual es el material más importante para detectores de infrarrojo. Actualmente las películas epitaxiales de mayor calidad de  $CdHgTe$  se obtienen mediante el uso de sustratos

de  $CdZnTe$ .

Recientemente Pérez-Bueno et.al [1] han estudiado esta clase de sustratos mediante difracción de rayos  $X$ , transmisión óptica, fotoluminiscencia y espectroscopía micro-Raman, con el fin de mejorar su calidad cristalina. Ellos bservaron que la calidad cristalina obtenida por medio del análisis del ancho completo a la altura media del pico ( $FWHM$ , por las siglas en inglés) debido a la difracción de la familia de planos  $\{111\}$ , presenta una recuperación alrededor del 4 y 7% en la composición de zinc, y después continúa descendiendo para mayores concentraciones de zinc. El aumento en la calidad cristalina se atribuye a la existencia de ciertas concentraciones para las cuales existe una distribución uniforme de zinc en los planos correspondientes al cadmio, lo cual a su vez, puede contribuir a la disminución de algunos tipos de defectos.

En otro tipo de estudios, en los que necesariamente hay un gradiente de temperatura, mediante medidas de fotoacústica y difracción de rayos  $X$ , Rodríguez et. al. [2] encontraron que la calidad cristalina ejerce una fuerte influencia sobre las propiedades térmicas de  $CdZnTe$  y que existe un valor máximo en la difusividad térmica cuando  $x \sim 0.04$ , y un valor mínimo en el  $FWHM$  de los picos de difracción de rayos  $X$  para  $x$  cerca de 0.06.

En este trabajo estudiamos el efecto de la concentración de  $Zn$  en la calidad cristalina del compuesto ternario  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  haciendo uso de un modelo computacional del crecimiento. Para simular el crecimiento de cristales de  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  en función de la concentración de  $Zn$  en el rango  $0 < x < 0.14$ , en la dirección  $[100]$ , extendimos el modelo computacional que realizamos anteriormente para el estudio de este cristal hasta concentraciones del 8% [3], el cual se encuentra basado en el desarrollado por Kim y Stern [4]. En este modelo se ocupan los sitios de la red zincblenda comenzando con un plano inicial (100) ( $Cd$  o  $Te$ ) y se colocan capas subsecuentes una encima de otra, imponiendo la restricción de no tener enlaces a primeros vecinos del tipo  $Cd-Cd$ ,  $Te-Te$  y  $Zn-Zn$ , basados en datos experimentales de espectroscopía micro-Raman reportados por Rodríguez et.al [5].

Dentro de la simulación se incluyó un coeficiente para determinar la probabilidad de tener un átomo específico en un sitio determinado. Este coeficiente se conoce como coeficiente de pegado (*sticking coefficient*); cambiando el valor del coeficiente de pegado se aumenta la probabilidad de adicionar átomos de  $Zn$  en el cristal.

La calidad cristalina se estimó de la siguiente manera: después de realizadas las simulaciones del crecimiento cristalino, las concentraciones de  $Cd$ ,  $Zn$  y  $Te$  fueron determinadas a partir del cristal simulado contando el número de átomos de cada uno de estos elementos; se calculó el número promedio de átomos de  $Zn$  en cada uno de los planos de la red. El parámetro de orden en el modelo de Kim-Stern puede relacionarse con la desviación de la distribución aleatoria para cada

plano de los átomos de  $Zn$  ( $\delta Zn$ ). Esta desviación estándar de los átomos de  $Zn$  se utilizó para reflejar la calidad cristalina del material: bajos valores de ( $\delta Zn$ ) significan un alto ordenamiento atómico aleatorio.

La figura 1 muestra la desviación estándar de la distribución de los átomos de zinc como función de la concentración de zinc para la red simulada de  $39 \times 39 \times 40$  átomos. Las flechas indican los puntos para los cuales la desviación estándar presenta valores mínimos, es decir para los cristales que tienen mejor calidad cristalina [3]. Es interesante ver que de acuerdo a la simulación computacional, es posible tener cristales con la misma concentración de zinc, pero con calidad cristalina muy diferente. Este es el caso por ejemplo para concentraciones de zinc cerca de 0.02, 0.04, 0.05, 0.07, 0.1 y 0.13; esto es debido a la distribución aleatoria del zinc en la red.

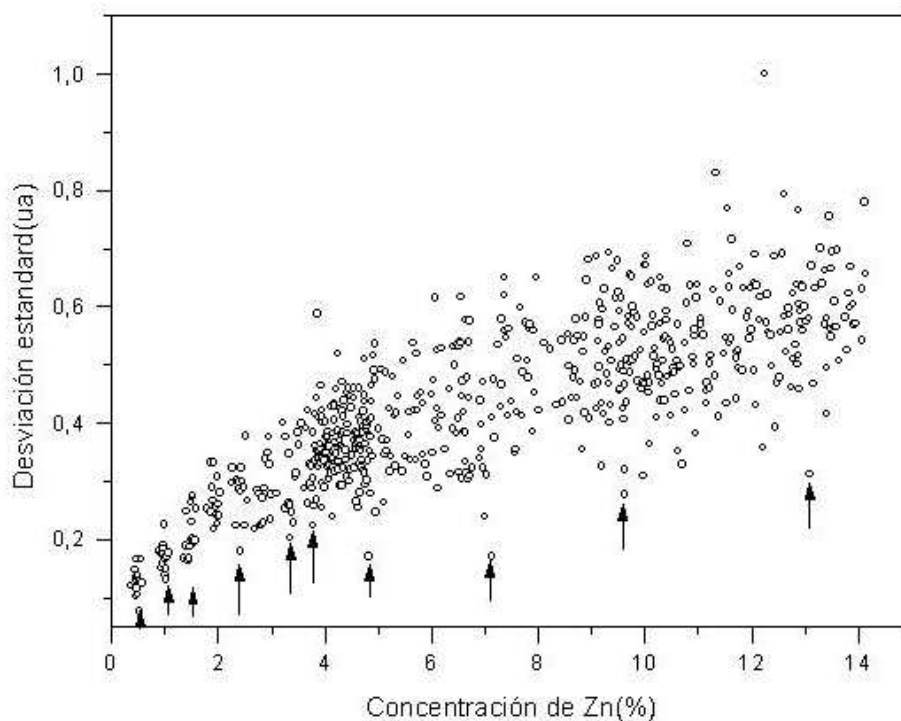


Figura 1: Desviación estándar como función de la concentración de  $Zn$  para una red de  $39 \times 39 \times 40$  sitios.

## CONCLUSIÓN

De acuerdo a la simulación computacional es posible tener cristales con la misma concentración de zinc, pero con calidad cristalina muy diferente, debido a la distribución aleatoria del zinc en la red. Hay diferentes concentraciones de zinc que permiten la mejor calidad cristalina. Para  $x$  cerca a 0.04 y 0.07 es posible tener una buena reproducibilidad en la composición de  $CdZnTe$ , resultado que se encuentra de acuerdo con los resultados experimentales reportados [3].

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue parcialmente financiado por el Instituto Colombiano para el Desarrollo de la Ciencia y la Tecnología, COLCIENCIAS, mediante el Convenio 055-2001-Formación de Jóvenes Investigadores.

## REFERENCIAS

- [1] J. J. Pérez-Bueno, M. E. Rodríguez, O. Zelaya-Angel, R. Baquero, J. González-Hernández, L. Baños, L. and B. Fitzpatrick, B. J., *J. Cryst. Growth* **209** (2000) 701.
- [2] M. E. Rodríguez, J. J. Alvarado, I. Delgadillo, O. Zelaya-Angel, H. Vargas, F. Sánchez-Sinencio, M. Tufiño and L. Baños *Phys. Status Solidi (a)* **158** (1996) 67.
- [3] M. E. Rodríguez, A. Gutiérrez, O. Zelaya-Angel, C. Vázquez and J. Giraldo *Journal of Crystal Growth* **233** (2001) 275.
- [4] K. Kim and E. A. Stern, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 1019.
- [5] M. E. Rodríguez, O. Zelaya-Angel, J. J. Pérez-Bueno, S. Jiménez-Sandoval S. and L. Tirado, *J. Cryst. Growth.* **213** (2000) 259.
- [6] Gutiérrez, A., *Calidad cristalina en función de la concentración del material ternario  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  y sus efectos sobre el coeficiente Seebeck*, Tesis de Maestría (Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, 2003).