

MODELIZACION DE PROPIEDADES EN SEMICONDUCTORES. COMPARACION DE RESULTADOS A PARTIR DE PROGRAMAS DIFERENTES

A. M. Martínez Nagy¹; N. Jimenez², P. Quartino² M. R. Soriano² y Alicia Trigubó^{2,3}, N. Rabinovich²

1. CEDIT-CeDITec (Comité Ejecutivo de Desarrollo e Innovación Tecnológica Centro de Desarrollo e Innovación Tecnológica). Félix de Azara 1890 5º piso, (3300), Posadas, Pcia. de Misiones, Argentina

2.-Dpto. de Ing. Química - Facultad Regional Buenos Aires, Universidad Tecnológica Nacional, Medrano 951, C1179AAQ, CABA, Argentina.

3. CINSO- CITEDEF-MINDEF-CONICET-UNIDEF, J. B. de La Salle 4397, 1603 V. Martelli, Pcia. de Bs. As., Argentina

E-mail: mrs@secyt.frba.utn.edu.ar

RESUMEN

1. INTRODUCCIÓN

Este trabajo se basa en cálculos *ab initio*, aplicado a semiconductores CdTe y aleaciones con Zn. Las tendencias actuales indican que la complejidad de los materiales recientemente desarrollados aumenta y el crecimiento de la potencia computacional disponible, más los algoritmos permanentemente mejorados, nos dan oportunidad de solucionar problemas de estructura electrónica.

Los semiconductores II-VI, entre ellos el TeCd en el que centramos nuestra atención en este trabajo, presentan una variedad de propiedades interesantes para diferentes aplicaciones. Su importancia tecnológica se debe a las aplicaciones que presenta en óptica no lineal, dispositivos fotovoltaicos, y semiconductores magnéticos diluidos.

2. METODOLOGÍA

Los códigos que se basan en ondas planas establecen requerimientos computacionales importantes para simular superceldas de gran tamaño y con baja simetría, por eso planteamos el uso de códigos basados en funciones de bases numéricas y localizadas para reducir costos computacionales. Se utiliza el código SIESTA PBE-GGA [1]. La optimización estructural y volumétrica de la celda sin dopar muestra resultados congruentes a los obtenidos para el mismo potencial utilizando WIEN2k. Los valores de energía de gap, son aceptables y comparables a los de otros autores (Tabla I). Los resultados de E_{gap} obtenidos con SIESTA son más elevados que los del Wien2k, aproximándose más a los experimentales (Tabla II). Lo explicamos por las diferencias existentes entre las funciones de base utilizadas por ambos códigos, el SIESTA debe ajustar la base para cada caso. Si el objetivo es evaluar parámetros estructurales como distancia de enlace y parámetros de celda, la metodología es válida. Utilizando los modelos construidos para ondas planas, se realiza la optimización estructural y volumétrica quitando todo tipo de restricción de simetría.

A pesar de las diferencias observadas en el gap, las propiedades de bulk, como los parámetros de celda, quedan bien descritas mediante el uso de potenciales basados en GGA, lo que permite obtener un parámetro de celda cúbico similar al determinado experimentalmente con $a=6,4827 \text{ \AA}$, con un valor de $a=6,501 \text{ \AA}$. El SIESTA aproxima mucho mejor estos valores con $a=6,640 \text{ \AA}$ y $E_{gap}=0,82 \text{ eV}$

Tabla .I datos de entrada optimizados utilizados para el cálculo con el programa Wien2k.

Semiconductores	CdTe	ZnTe	Cd _{0,96} Zn _{0,04} Te	Cd _{0,90} Zn _{0,10} Te
Parámetro de celda optimizado (Å)	6,615	6,193	13,1920	13,1660
Grupo espacial	216 (F-4 3 m)	216 (F-4 3 m)	215 (P-43m)	215 (P-43m)
Ángulos	$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \delta = 90^\circ$	$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \delta = 90^\circ$	$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \delta = 90^\circ$	$\alpha = 90^\circ, \beta = 90^\circ, \delta = 90^\circ$
Posición de los átomos	Cd: X=0,00; Y=0,00; Z=0,00 Te: X=0,25; Y=0,25; Z=0,25	Zn: X=0,00; Y=0,00; Z=0,00 Te: X=0,25; Y=0,25; Z=0,25	Zn: (½,½,½)	Zn: (½,½,0) Zn: (½,0,½) Zn: (0,½,½)
Radio de muffin tin (a. u.)	R _{MT} (Cd) = 2,35; R _{MT} (Te) = 2,55	R _{MT} (Zn) = 2,35; R _{MT} (Te) = 2,55	R _{MT} (Cd) = 2,35 R _{MT} (Te) = 2,55 R _{MT} (Zn) = 2,35	R _{MT} (Cd) = 2,35 R _{MT} (Te) = 2,55 R _{MT} (Zn) = 2,35
Número de puntos k	2000	2000	250	250
RK _{max}	9	9	7,2	6,8

El uso del potencial mBJ en el caso del CZT puede reproducir los valores experimentales.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Inspirados en la estructura cinc-blenda original para el CdTe, se construyeron los modelos realizando superceldas cúbicas para poder simular dopados de 4 y 10 % en Zn (Figura 1). Se consideró un sistema cristalino cúbico primitivo basado en grupo espacial P-43m. Los resultados obtenidos muestran un incremento de la energía de gap respecto a la fase sin dopar, con energías de 0.611 eV y 0.620 eV para el caso de dopados de 4% y 10% en Zn respectivamente. Al tiempo que se observa un decrecimiento en los parámetros de celda al incrementar el contenido de Zn.

Los valores se presentan en Tabla II. Este es un resultado esperado ya que el tamaño del Zn es menor que el Cd induciendo una contracción de los enlaces metal-Te, reduciendo los parámetros de celda. Respecto a la estructura electrónica puede mencionarse que la banda de valencia se debe mayoritariamente a los estados 5p del Te, mientras que la banda de conducción se debe a estados 4p y 5p de Zn y Cd respectivamente.

Tabla II. Resultados de los programas SIESTA y WIEN2k

CODIGO	SIESTA		
Estructura	CdTe	Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te	Cd_{0,90}Zn_{0,10}Te
Parámetro óptimo de la celda (Å).	6,640	6,625	6,600 [12]
E_{gap} (eV)	0,82	1,00	0,92
Eg (eV) Otros Autores	1,88	-----	-----
Longitud de enlace: d (Å)	Cd-Te= 2,8724	Cd-Te =2,875 Zn-Te =2,744	Cd-Te =2,856 Zn-Te =2,745
CODIGO	WIEN2K		
Estructura	CdTe	Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te	Cd_{0,90}Zn_{0,10}Te
Parámetro óptimo de la celda (Å).	6,420 6,628 6,622 6,618 6,501	6,38]	6,33
E_{gap} (eV)	0,597 0,564] 0,601] 0,571 0,577	0.611	0.620
Eg (eV) Otros Autores	0,566[3 4] 0,483[3 5] 0,650[3 6]	0,62 [38]	0,644
Longitud de enlace: d (Å)	Cd-Te= 2,807	(Cd,Zn)-Te= 2,762	(Cd,Zn)-Te= 2,762

La presencia de orbitales d por parte de Cd y Zn, que se encuentran localizados y cercanos a los niveles p del Te, inducen cambios importantes al nivel de Fermi. El

agregado de Zn, que produce una reducción de las distancias de enlace respecto del Cd-Te, estabiliza los niveles p del Te y repele los niveles de antienlace de Cd y Zn por encima del nivel de Fermi, produciendo así el incremento en el gap. Este efecto es mayor cuanto más Zn se agrega a la estructura. Este resultado puede generalizarse para el caso de otros potenciales de correlación e intercambio.

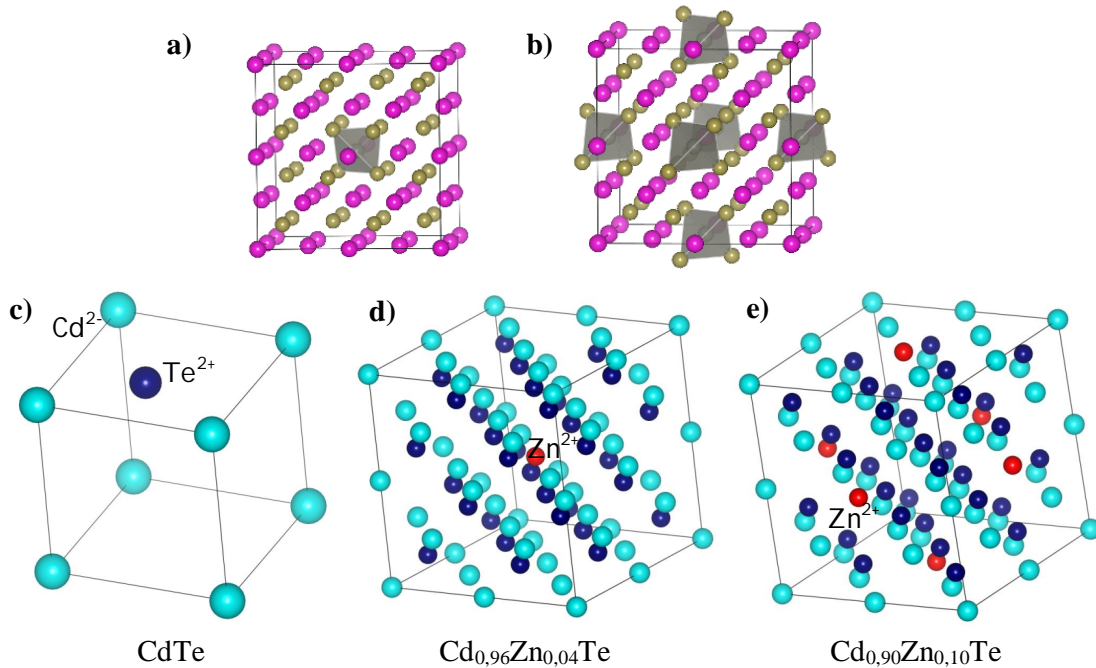


Figura 1. Superceldas utilizadas para modelar las composiciones (a y d) Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te, (b y e) Cd_{0.90}Zn_{0.10}Te y (c) CdTe (celda original).

4. CONCLUSIONES

Fue posible simular mediante dos métodos distintos, el dopado del compuesto CdTe con Zn. En un primer caso, utilizando el código WIEN2k se pudo entender cualitativamente el efecto del dopado con Zn, que produce una contracción de los parámetros de celda y un incremento en la energía de gap. El uso del código SIESTA deja de lado constricciones de simetría y permite evidenciar distorsiones locales que se propagan a lo largo del retículo debido a la diferencia notoria en distancias de enlace.

Referencias

- [1] Soler, José M.; et al. (2002). «The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation». *Journal of Physics: Condensed Matter* 14: pp.2745-2779.
- [2] F. Tran, P. Blaha Phys. Rev. Lett. 102, 226401 (2009)