

CAPITULO 1

Estructura de cristales semiconductores

1.1.-Estructura cristalina.

Un cristal ideal es una infinita repetición periódica de estructuras “unitarias” idénticas en el espacio. En los cristales más simples esta unidad es un sólo átomo, como en el cobre, oro, plata, hierro, aluminio y metales alcalinos. Pero en general, la estructura “unitaria” puede estar compuesta de muchos átomos o moléculas. La estructura cristalina puede describirse en términos de una red, con un grupo de átomos “atado” a cada punto de la red. Este grupo de átomos se llama “base”. Cada base de un mismo cristal es idéntica a las demás en composición, arreglo y orientación. En la Figura 1.1 se muestra un esquema de un arreglo cristalino en donde se ha sombreado una “celda primitiva” formada por un paralelepípedo, el cual se repite a lo largo de la estructura.

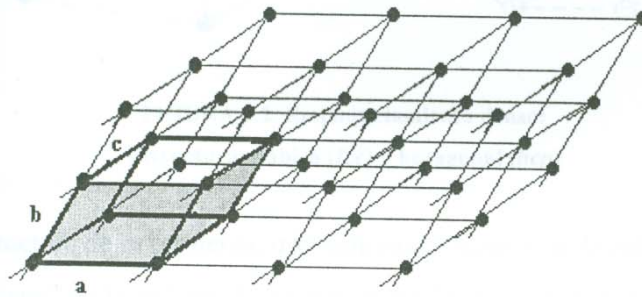


FIGURA 1.1. Celda primitiva en una red cristalina

Los vectores a , b , c , indicados en la figura son vectores de “traslación” de la red. Existe un sólo punto de red en cada celda primitiva. En tres dimensiones, 14 tipos diferentes de red definen todas las configuraciones cristalinas posibles [37]. La fracción del volumen ocupado por los átomos, vistos como esferas en una celda primitiva, contra el volumen de

la celda que ocupan, se denomina empaquetamiento. El empaquetamiento más denso se obtiene cuando las esferas se tocan. El grado de compactación en un cristal se limita por la clase y tamaño de los átomos que componen la estructura. La mitad de los elementos químicos, y todos los metales muestran estructuras compactas simples. De estas estructuras compactas existen dos variantes, una cúbica y otra hexagonal. La configuración de máximo empaquetamiento se obtiene con dos tipos de redes cristalinas: cúbica centrada en las caras (*fcc*), y hexagonal (*hcp*). La configuración de tipo cúbico admite otras dos clases de redes cristalinas: cúbica simple (*sc*) y cúbica centrada en el cuerpo (*bcc*). La configuración hexagonal admite un sólo tipo de red. En la Figura 1.2 se muestran las estructuras cristalinas *fcc* y *hcp*.

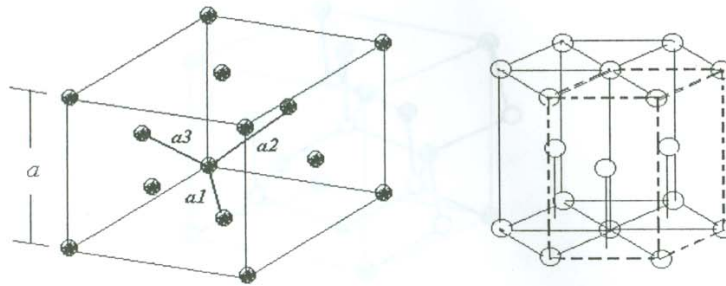


FIGURA 1.2. Empaquetamiento denso:
Estructuras cúbica (*fcc*) y hexagonal (*hcp*)

En la estructura de la izquierda, a se denomina “constante de red”, a_1 , a_2 y a_3 son los “vectores primitivos” de la red *fcc*. En la estructura de la derecha de la figura, (*hcp*) se ha señalado el prisma que da origen a la celda primitiva de esta estructura.

Las propiedades optoelectrónicas de un semiconductor están determinadas por las características especiales de su estructura cristalina. La materia al agruparse para formar un cristal, lo hace minimizando la energía libre de Gibbs, esto es, formando enlaces y estructuras lo más estables posible, y además tratando de dar una forma compacta al arreglo, como si los átomos y moléculas fueran esferas. La tendencia de los elementos a cristalizar en estructura compacta se conserva en muchos compuestos AB y sus soluciones sólidas o ternarias A_1A_2B ó AB_1B_2 . Esta tendencia puede verse como dos estructuras

compactas interpenetrándose una en la otra, una conteniendo los cationes A y la otra los aniones B. El enlace se presenta entre los átomos más cercanos. En el caso de los semiconductores II-VI, el mayor porcentaje de unión entre átomos es de tipo iónico y la coordinación tetraédrica (4 direcciones equidistantes) se conserva, de modo que cada átomo se enlaza con otros 4 equidistantes a la distancia mínima. El número de coordinación 4 es sinónimo de coordinación tetrahédrica. Existen dos estructuras con coordinación tetrahédrica para compuestos AB, la zincblenda (cúbica) y la wurtzita (hexagonal). La estructura zincblenda (o esfalerita) es un entrelazado de dos estructuras cúbicas compactas con coordinación tetrahédrica que se muestra en la Figura 1.3.

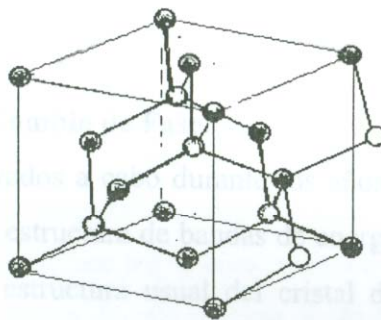


FIGURA 1.3.-Estructura Zincblenda

Para referencia, en esta estructura cúbica el átomo A puede tomarse como el punto (000) en un vértice del cubo, y el átomo intersticial B en el punto $(a/4, a/4, a/4)$, en donde a , es la arista del cubo o “constante de red”. Por tanto, el vector “base” que representa la distancia más corta entre un anión y un catión, es paralelo a la diagonal de cuerpo de la celda cúbica. En el caso en que A y B son átomos de la misma clase, la estructura se denomina diamante. Como puede apreciarse de la Figura 1.3, el cubo así formado tiene un átomo del mismo tipo en el centro de cada cara. Esta estructura es del tipo “fcc”.

La estructura wurtzita es un arreglo hexagonal del entrelazado de dos estructuras compactas hexagonales. Se muestra en la Figura 1.4. En ella se aprecia la coordinación tetrahédrica entre los enlaces. El CdTe tiene estructura zincblenda, aunque es posible

tetraédrica entre los enlaces. El CdTe tiene estructura zincblenda, aunque es posible encontrarlo en forma de wurtzita. Otros compuestos II-VI, como el ZnS, cristalizan en forma de zincblenda, en tanto que el CdS y el CdSe cristalizan en forma de wurtzita.

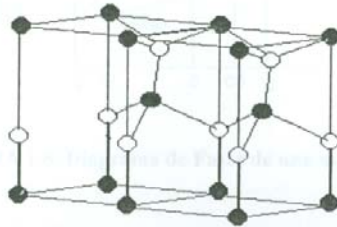


FIGURA 1.4. Estructura Wurtzita.

En esta figura se muestran dos celdas unitarias.

1.2.-Estructura del CdTe. Cambio de Fase.

Intensos estudios llevados a cabo durante los años 60's y 70's, nos han permitido conocer los parámetros de la estructura de bandas de energía del CdTe en estructura cúbica (esfalerita) [38]. Ésta es la estructura usual del cristal de CdTe, a presión atmosférica. También se denomina zincblenda. Sin embargo, puede existir también en forma hexagonal (wurtzita) [39], como sucede con otros semiconductores del tipo II-VI tales como el CdS, CdSe, etc. Para el CdTe, sin embargo, esta fase es metaestable; su estructura depende en alto grado de condiciones de crecimiento como la temperatura, orientación del sustrato, presiones parciales, etc.

En ocasiones se encuentra que es posible cambiar una fase cristalina a otra, mediante alguna perturbación externa, por ejemplo, la presión sobre el cristal. La transformación de fase cúbica a fase hexagonal puede obtenerse mediante compresión para algunos cristales. Este tipo de transiciones fue mencionado por primera vez para InSb [40]. Un diagrama de fases es una manera gráfica sencilla de sintetizar las características estructurales de una aleación binaria. En la Figura 1.5 se presenta un ejemplo en el que se muestra la concentración de la aleación, contra la temperatura de tratamiento de dicha aleación:

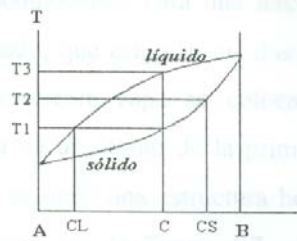


FIGURA 1.5. Diagrama de Fases de una mezcla A-B

En este ejemplo, el eje horizontal representa las concentraciones de los componentes A y B. La mezcla CL a una temperatura T_1 es líquida, mientras que la mezcla CS, a una temperatura mayor T_2 es sólida. Si una mezcla sólida C se calienta, al llegar a la temperatura T_1 , empieza a cambiar a fase líquida. Entre la curva superior y la inferior coexisten ambas fases. A una temperatura T_3 es totalmente líquida. Cuando un cristal sufre una transformación a una nueva fase cristalina, la transformación se denomina *polimórfica*. Ésto puede ocurrir variando la temperatura sobre el cristal, como por ejemplo el hierro, que cambia su fase cristalina *bcc* a la fase *fcc*, o bien, variando la presión sobre el cristal, como el CdS y CdSe que se transforman de esta manera desde la fase wurtzita, pasando por una región metaestable de fase zincblenda, a la fase sal de roca. En el caso de CdTe, la evolución es mucho más simple. Bajo presión, la fase natural zincblenda pasa a la fase de sal de roca, sin pasar por una transición de orden-desorden. La fase hexagonal no aparece en los reportes de cambio de fase mediante presión para el CdTe. [41]

1.3.-Relación entre las estructuras cúbica y hexagonal.

Es posible comprender de manera aceptable la estructura de los sólidos cristalinos, suponiendo que los átomos que componen la materia son esferas pequeñas e incompresibles, entre las cuales actúan fuerzas de atracción y repulsión. En un empaquetamiento denso (*close packed*), la densidad es máxima. En el caso de esferas del mismo tamaño, en el mismo plano, cada una está rodeada de otras seis. En cada hueco entre esferas es posible colocar una esfera del siguiente plano. El número de huecos disponibles para esta segunda capa, es el doble del