

**CALIDAD CRISTALINA, HOMOGENEIDAD EN COMPOSICIÓN Y TRANSMISIÓN  
ÓPTICA DEL Cd(1-x)Zn(x)Te (0 ≤ x ≤ 0,1)**

Ana M. Martínez<sup>1,2</sup>, Alicia B. Trigubó<sup>1,2</sup>, Eduardo. A. Heredia<sup>1</sup>; Raúl L. D'Elía<sup>1</sup>

1. CINSO- CITEDEF-MINDEF-CONICET-UNIDEF, J. B. de La Salle 4397, B1603ALO V. Martelli, Pcia. Bs. As., Argentina

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

e-mail: atrigubo@citedef.gob.ar

## 1. INTRODUCCIÓN

El Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te (CZT) es un semiconductor importante para la fabricación de detectores de rayos x y gamma (γ) dado que pueden ser usados a temperatura ambiente [1]. Es importante obtener lingotes con una distribución uniforme de Zn, dado que esto determina uniformidad en la resistividad eléctrica y en el gap de energía [2]. Se lo emplea también como sustrato para el crecimiento de películas epitaxiales de HgCdTe sensibles a la radiación IR.

Se obtuvieron lingotes de Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te (0 ≤ x ≤ 0,1) por el método de Bridgman utilizando dos velocidades con el objeto de encontrar las condiciones óptimas de crecimiento monocristalino. Para ello se estudió la calidad cristalina por revelado químico, se determinó la composición química utilizando una microsonda electrónica dispersiva en longitudes de onda y la transmisión óptica por espectrometría infrarroja.

## 2. METODOLOGÍA

Los elementos de partida (Cd, Zn y Te) se adquirieron comercialmente con pureza de 99,9999 % y posteriormente se los purificó por destilación en vacío dinámico con el objeto de no alterar el rango de energía de operación del dispositivo. El método de Bridgman consiste en la solidificación fraccional de la aleación previamente fundida al pasar por un gradiente de temperatura. Se emplearon dos velocidades: 1,66 y 3,32 mm/h.

Una vez crecidos los lingotes, se los orientó cristalográficamente por difracción de rayos-X en la dirección [111] (técnica de Laue). Se cortaron obleas de 2 mm de espesor utilizando una sierra de hilo (South Bay Technology). Dichas obleas fueron pulidas mecánicamente (Bühler-Minimet) primero con alúmina de 1 μm y químicamente con una solución de Br<sub>2</sub> en etilenglicol al 1% V/V.

La calidad cristalina se estudió por revelado químico. Para ello se utilizó la solución de Nakagawa (3HF:2H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>:2H<sub>2</sub>O) [3, 4] que revela dislocaciones en el plano cristalográfico (111)Cd. La determinación de la densidad de dislocaciones y desorientación entre subgranos contiguos se efectuó por conteo sobre micrografías ópticas (Union Versamet) en las que se aplicó la aproximación de Read Schokley en el último caso [5].

La composición química se determinó utilizando una microsonda electrónica dispersiva en longitudes de onda Cameca SX50 (CNEA-CAC). Se utilizaron patrones de Cd, Zn y Te, material extraído del que fuera previamente adquirido y purificado.

La transmitancia del CdTe y la del CdTe aleado con 2% y 5 % at de Zn se determinó con un Espectrómetro Infrarrojo de Transmisión y se la comparó con la obtenida para sustratos comerciales (eV products). Se utilizó un espectrómetro infrarrojo (IR) de

transformada de Fourier marca Perkin Elmer modelo System 2000 (CEILAP-CITEDEF).

### 3. RESULTADOS

#### 3.1 Estudio de la calidad cristalina por revelado químico

Se muestra una de las micrografías ópticas de la superficie de las obleas que permiten observar la distribución de dislocaciones y la estructura de subgranos debido a la presencia de las figuras de corrosión (Figura 1). Se ha elegido como ejemplo la que corresponde al 5% at de Zn por tratarse de la composición elegida para hacer los dispositivos.

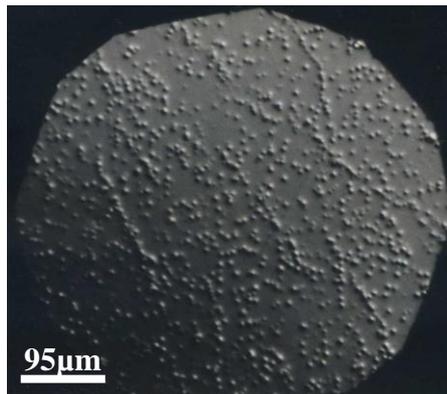


Figura 1.  $\text{Cd}_{0,90}\text{Zn}_{0,10}\text{Te}$ ,  $v = 1,66\text{mm/h}$ ,  
 $\delta = 6,9 \text{ E}5 \text{ cm}^{-2}$ ,  $\varphi = 19^\circ$

#### 3.2 Análisis de la homogeneidad en composición

Algunas de las medidas de composición química efectuadas en la microsonda electrónica en obleas de CZT con 5% at de Zn se pueden observar en el gráfico de la Figura 2.

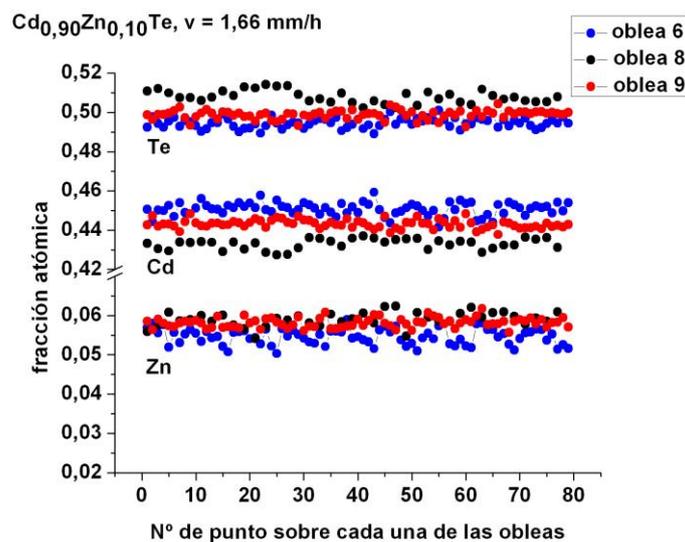


Figura 2. Resultados de la Microsonda Cameca para obleas del lingote (5 % at de Zn).

El análisis de la concentración de todos los elementos se realizó sobre la superficie de obleas cortadas a lo largo del lingote según la dirección [111],

A pesar de que el Zn es un dopante sustitucional del Cd, su masa mucho menor hace que se incorpore preferentemente en el crecimiento de monocristales con un coeficiente de distribución  $k=1,35$  [6], lo que conduce a su segregación durante el crecimiento por lo que la concentración del lingote no es uniforme [7]. Hay una mayor homogeneidad en composición en obleas centrales de dichos lingotes.

### 3.4 Detección de precipitados de Te en muestras de CZT por transmisión óptica

Los precipitados e inclusiones de Te introducen tensiones y distorsionan la estructura cristalina [8, 9], lo que reduce la transmisión óptica de los cristales [10, 11] además degrada las propiedades eléctricas. Cuando los precipitados de Te tienen un gran tamaño, la transmisión IR es inferior al 60% [12].

Los espectros de las muestras de  $\text{Cd}_{0,90}\text{Zn}_{0,10}\text{Te}$  crecidas en el CINSO a 1,66 y 3,32 mm/h se detallan en la Figura 3. El valor de transmisión de la muestra crecida a menor velocidad tiene una transmitancia de un 67% y es levemente superior al de la muestra crecida a mayor velocidad. Ambos espectros de transmisión tienen valores superiores a los de las muestras comerciales de CdTe y  $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ . Estos valores son comparables a los reportados en la literatura para crecimientos de buena calidad cristalina [12, 13].

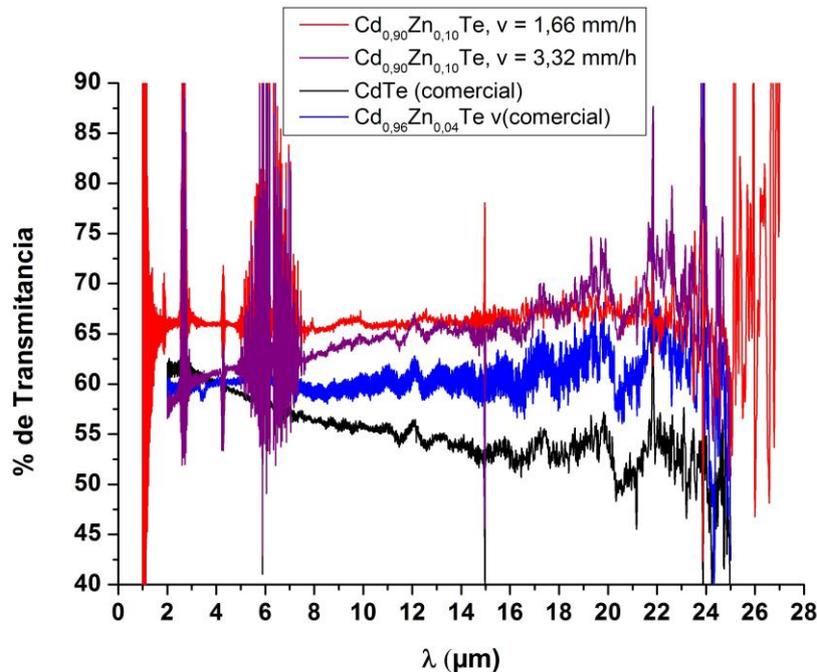


Figura 3. Espectro de transmisión óptica del  $\text{Cd}_{0,90}\text{Zn}_{0,10}\text{Te}$  crecido en el CINSO.

## 4. Conclusiones

Se comprobó experimentalmente que las soluciones de revelado químico para el CdTe puro y para el aleado al 2 % at también son eficientes para el aleado al 5 % at de Zn. Los valores promediados de la densidad de dislocaciones y la desorientación entre subgranos contiguos, en todos los lingotes, es comparable. Independientemente de la concentración del lingote los defectos lineales aumentan en las obleas que se aproximan al extremo superior (zona de descarte del material). En la parte inferior del lingote ocurre el mismo fenómeno, en ambos casos se produce la concentración de impurezas durante su crecimiento.

Los lingotes crecidos a menor velocidad son los de mejor calidad cristalina por tener a lo sumo dos granos de distinta orientación cristalográfica y permitir en consecuencia un mayor aprovechamiento del material. Presentan además una mayor homogeneidad en composición en la zona central del lingote. En los extremos del mismo fundamentalmente la dispersión de los datos se debe a la segregación de impurezas. Las muestras de  $\text{Cd}_{0,90}\text{Zn}_{0,10}\text{Te}$  crecidas a menor velocidad son las que presentan los mejores espectros de transmisión infrarroja, las crecidas a mayor velocidad también presentan una transmitancia superior a la comercial, pero de una calidad cristalina inferior respecto a la de menor velocidad. En el crecimiento del CdTe aleado con 4 y 10 % de Zn un sobrecalentamiento de 20°C sobre el punto de fusión permitió disminuir la formación de los agregados de Te, produciendo un excelente resultado en la calidad estructural de los lingotes crecidos.

## 5. Referencias

1. S. Sen, J.E. Stannard, *Progress Crystal Growth and Characterization*, 29 (1994) 253-273.
2. V. Babentsov, J. Franc, A. Fauler, M. Fiederle, R. James, *J. Cryst. Growth* 310 (2008) 3482–3487.
3. K. Nakagawa, K. Maeda, S. Takeuchi, *Appl. Phys. Lett.*, 34 (1979) 574-575.
4. K. Nakagawa, K. Maeda, S. Takeuchi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 49 (1980) 1909-1915.
5. W.T. Read, "Dislocations in crystals", Mc-Graw-Hill, Nueva York, (1953), p. 156-159.
6. A. Tanaka, Y. Masa, S. Seto, T. Kawasaki, *J. Cryst. Growth* 94 (1989) 166 - 170.
7. L. Marchini, N. Zambelli, G. Piacentini, M. Zha, D. Calestani, E. Belas, A. Zappettini, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 633 (2011) S92–S94.K.
8. Zanio, in: R.K. Willardson, A.C. Beer (Eds.), *Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, New York, (1978) 125–129.
9. G.W. Greenwood, A.J.E. Foreman, O.E. Rimmer, *J. Nucl. Mater.* 4 (1959) 305–324.
10. R.D.S. Yadava, B.S. Sundershesu, M. Anandan, R.K. Bagai, W.N. Borle, *J. Electron. Mater.* 23 (1994) 1349–1357.
11. W.J. Kim, M.J. Park, S.U. Kim, T.S. Lee, J.M. Kim, W.J. Song, S.H. Suh, *J. Cryst. Growth* 104 (1990) 677–682.
12. X. Zhang, Z. Zhao, P. Zhang, R. Ji, Q. Li, *Journal of Crystal Growth* 311 (2009) 286–291.
13. E. Diéguez, *Comprehensive Semiconductor Science and Technology*, Volumen 3 (2011) 170-201.