

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA  
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE BOLSAS DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

UM ESTUDO DO SEMICONDUTOR CdTe VIA  
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Bolsista: Teônís Silva de Paiva, CNPq

MANAUS  
2010

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA  
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE BOLSAS DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL  
PIB-E-0073-2008  
UM ESTUDO DO SEMICONDUTOR CdTe VIA  
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Bolsista: Teônias Silva de Paiva, CNPq

Orientador: Denilson da Silva Borges

MANAUS

2010

## Resumo

O material semiconductor CdTe é muito utilizado em aplicações tecnológicas, como por exemplo a aplicação em células solares, por este motivo vem sendo altamente estudado. Por isto fomos motivados a estudá-lo de forma computacional. Para isto utilizou-se a técnica de Dinâmica Molecular, que calcula a força de interação de um sistema contendo um grande número de átomos a partir de um potencial que descreva bem esta interação. O potencial utilizado foi o de Vashista-Rahman, que descreve interações de carga-carga, carga-dipolo, dipolo-dipolo e a repulsão estereométrica, entre átomos. As simulações nos mostraram que a temperatura de transição de fase do CdTe do estado sólido para o estado líquido é em torno  $1000K$ . Na fase líquida os átomos de CdTe estão mais dispersos que na fase sólida. Assim as simulações realizadas estão descrevendo corretamente a realidade do sistema proposto.

# Sumário

Resumo	2
1 Introdução	4
2 Revisão bibliográfica	5
2.1 Semicondutor CdTe . . . . .	5
3 Metodologia	7
4 Resultados	8
5 Conclusão	10
Referências	11
Cronograma das atividades realizadas	12

# 1 Introdução

Os semicondutores surgiram na década de 20 como promessa de revolução tecnológica. Hoje em dia é grande o número de suas aplicações, vão desde aparelhos eletroeletrônicos como, televisores e computadores, até células solares. Nesta última aplicação o semicondutor CdTe vem se destacando nos últimos anos. Por ter propriedades físico-químicas que torna fácil a obtenção de células de boa qualidade por métodos relativamente baratos, o telureto de cádmio tornou-se muito atrativo para a indústria. A simulação computacional é uma forma de se estudar estes materiais, com auxílio de um bom computador e de ferramentas matemáticas apreciáveis, pode-se obter resultados da mesma ordem de precisão de um laboratório.

Um dos métodos mais utilizados de simulação computacional é o método de dinâmica molecular, que consiste basicamente em determinar o movimento de átomos de um material, através de um potencial de interação entre os mesmos.

O projeto de iniciação científica visa estudar as propriedades, de forma computacional, do semicondutor CdTe. Este trabalho tem por objetivo expor os métodos utilizados no projeto, seus resultados bem como sua interpretação.

O trabalho está dividido em quatro partes. Na primeira é apresentada uma pequena revisão sobre as principais propriedades do CdTe. Uma pequena descrição do método de dinâmica molecular e do potencial de interação utilizado é encontrada na segunda parte. Na terceira tem-se os resultados das propriedades simuladas do semicondutor em estudo. Na quarta parte encerra-se o trabalho com uma conclusão.

## 2 Revisão bibliográfica

### 2.1 Semicondutor CdTe

O semicondutor CdTe, telureto de cádmio, é formado por um átomo da coluna II e outro da VI coluna da tabela periódica. Este material apresenta como estrutura mais estável, a pressão atmosférica a blenda de zinco com um parâmetro de rede  $a=6,482 \text{ \AA}$ , [1]. Esta estrutura é formada por duas redes cúbicas de faces centradas que se interpenetram, Figura 1.

O CdTe também pode se cristalizar na estrutura wurzita que, é uma estrutura do tipo hexagonal compacta, com parâmetros de rede são  $b=4,57 \text{ \AA}$  e  $c=7,47 \text{ \AA}$ , Figura 2.

Dentre os semicondutores da família II-VI, da tabela periódica, o CdTe é o que tem maior parâmetro de rede, apresenta a mais baixa temperatura de fusão ( $1092^\circ \text{ C}$ , sob pressão de 1 atm), pode receber dopagem tipo p ou tipo n, através da inclusão de átomos de outras colunas da tabela periódica ou por desvio de estequiometria[2].

O CdTe possui banda proibida de  $1,5\text{eV}$ , em temperatura ambiente, e um coeficiente de absorção ótica da ordem de  $10^4\text{cm}^{-1}$  [3]. Estes valores são bem próximos dos valores ideais para a conversão de luz solar em eletricidade, por isso o CdTe vem sendo usado na fabricação de células solares.

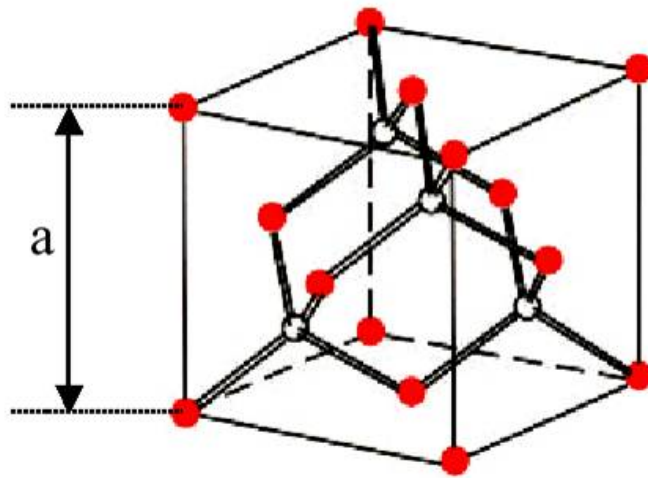


Figura 1: Estrutura blenda de zinco do semiconductor CdTe, Ref.[4]

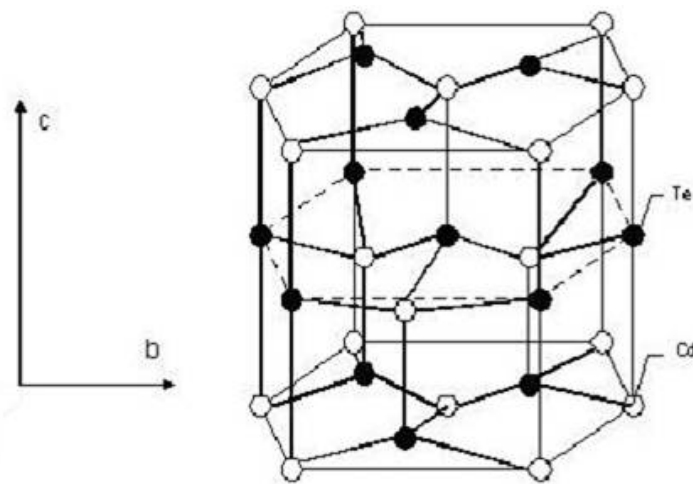


Figura 2: Estrutura wurzita do semiconductor CdTe,[5]

### 3 Metodologia

Primeiramente considerou-se uma amostra de CdTe que, contenha 1000 átomos. Utilizou-se a técnica de dinâmica molecular, técnica de simulação computacional que considera os átomos como partículas puntiformes, para se resolver as equações de movimento dos átomos, [6]. A dinâmica molecular segue as leis da Mecânica Clássica e, o cálculo das forças de interações entre átomos está entre os principais passos da simulação. A força sobre um determinado átomo  $i$  é estabelecida em função da energia potencial relacionada com a posição deste átomo, ou seja:  $F_i = -\nabla V(r_i)$ . Sendo,  $V(r)$  a energia potencial do sistema em função das posições dos  $N$  átomos e  $r$  as coordenadas. O potencial utilizado na interação dos átomos, foi o potencial de Vashista-Rahman que,[7], leva em conta as várias contribuições como as interações Coulombianas resultantes da transferência de carga, a repulsão estereométrica devido aos tamanhos atômicos, e interações de carga-dipolo e dipolo-dipolo para incluir os efeitos da polarizabilidade eletrônica dos átomos bem como as interações covalentes de três corpos.

Utilizando integrações numéricas da equação de Newton obtemos as posições e velocidades de todos os átomos do sistema em qualquer instante de tempo. E assim pode-se obter as grandezas estruturais do CdTe.



## 4 Resultados

Utilizando as velocidades dos átomos e o auxílio da linguagem de programação Fortran, conseguimos mostrar a variação da energia cinética média de cada partícula em função da temperatura média das mesmas que,[8], pode ser visualizada pelo gráfico abaixo:

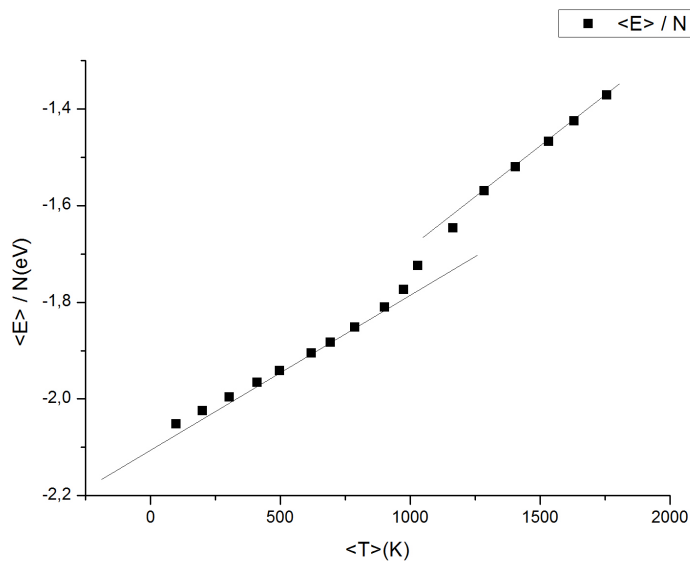


Figura 3: Transição de fase sólido-líquido do CdTe, esta transição encontra-se na faixa de 1000 a 1200K, estando em perfeito acordo com o resultado experimental.

pelo gráfico acima vemos que na faixa de temperatura de 1000K a 1200 K ocorre uma transição de fase, o CdTe passa da fase sólida para a líquida.

Pode-se também visualizar a função de correlação de pares (medida de se encontrar uma determinada partícula em relação a uma distância de uma outra,[9]) para o CdTe, cristalino e para o estado líquido.

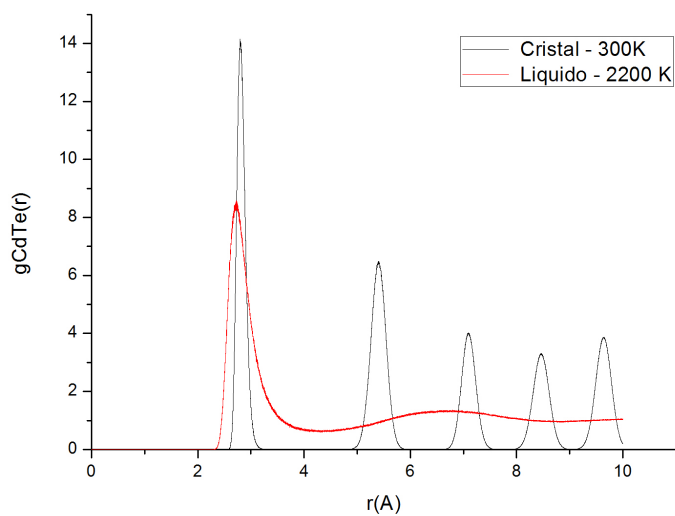


Figura 4: função de correlação dos pares

pela figura 4, vemos na fase cristalina do CdTe os átomos estão bem próximos um do outro, já na fase líquido eles estão bem dispersos como se devia esperar.

## 5 Conclusão

Usando o potencial de interação de Vashista-Rahman apresentamos resultados acerca das propriedades estruturais do material semiconductor CdTe, obtidos a partir das técnicas de simulação de Dinâmica Molecular. Vemos como é vantajoso a utilização de uma simulação, pois com a utilização de um potencial de interação bem definido e uma linguagem de programação que realize nossos cálculos podemos fazer análises em determinados materiais, sem a utilização de caros equipamentos.

## Referências

- [1] LIMA, Suelayne Moreira. Variações microestruturais em filmes finos de CdTe submetidos ao tratamento térmico com CdCl<sub>2</sub>. 2000. 88f. Tese (Mestrado em Ciências dos Materiais)- Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro.
- [2] SUELA, Jeferson. Caracterização de pontos quânticos e filmes ultrafinos de CdTe/Si(111). 2007. 77f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais.
- [3] CRUZ, L.R. Efeito do Tratamento Térmico-Químico nas Propriedades Luminescentes de Filmes de CdTe
- [4] REVISÃO Bibliográfica. Disponível em: <[http://www.maxwell.lambda.ele.puc-rio.br/cgi-bin/PRG\\_0599.EXE/7072\\_3.PDF?NrOcoSis=20091&CdLinPrg=pt](http://www.maxwell.lambda.ele.puc-rio.br/cgi-bin/PRG_0599.EXE/7072_3.PDF?NrOcoSis=20091&CdLinPrg=pt)>. Acesso em: 22 agosto 2008.
- [5] SEMICONDUTORES. Disponível em: <<http://www.prof2000.pt/users/lpa>>. Acesso em: 22 agosto 2008.
- [6] NAKAHARA, Adriana Silva. Análise de métodos de simulação de dinâmica molecular em arquiteturas paralelas.2007. 161f. Tese(Mestrado em Computação Aplicada)- Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos.
- [7] D.S. Borges e J.P.Rino, Physical Review B72, 014107(2005)
- [8] RINO, José Pedro. Notas sobre Simulação Computacional, 2001.
- [9] J.P.Rino e N. Studart, Quim. Nova, Vol. 24, No. 6, 838-845, 2001.

## Cronograma das atividades realizadas

Descrição	ago/08	set	out	nov	dez	jan/09	fev	mar	abr	mai	jun	jul
Levantamento bibliográfico do Material CdTe	X	X										
Estudo de Mecânica Estatística			X	X	X							
Estudo sobre Dinâmica Molecular						X	X	X				
Estudo do Programa (código fonte) de Dinâmica Molecular									X	X		
Elaboração do Resumo e Relatório Final											X	
Preparação da Apresentação Final para o Congresso												X

 Atividades já realizadas

Figura 5: Cronograma das Atividades Realizadas