

INTERACCIONES HIPERFINAS DE ^{111}Cd EN MONOCRISTALES DE InSe

J. Shitu*, L. Damonte**, L. A. Mendoza Zelis**, A. F. Pasquevich***, F. H. Sánchez**,
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata,
Casilla de Correo N° 67, (1900) La Plata.

B. Marí

Universidad Politécnica de Valencia, España.

El semiconductor InSe es un material de interés tecnológico debido a las propiedades de "switching" que posee. En orden a investigar la relación entre esta propiedad macroscópica y las interacciones hiperfinas de impurezas aceptoras de Cd, se llevaron a cabo determinaciones de las interacciones cuadrupolares eléctricas de impurezas de ^{111}Cd en muestras mono y policristalinas de InSe, utilizando como técnica experimental las Correlaciones Angulares Perturbadas. Se comparan los resultados obtenidos experimentalmente con cálculos teóricos realizados usando un modelo de cargas puntuales.

I. INTRODUCCIÓN

El compuesto InSe presenta propiedades de switching, esto es, una curva I-V que tiene las siguientes características (Fig. 1):

a) una región OFF, en la cual la corriente es pequeña y se incrementa con el voltaje aplicado, primero linealmente, luego de acuerdo con la relación de Pool-Frenkel ($I = I_0 \exp[(V/V_0)^{1/2}]$) y una tercera parte donde el crecimiento es exponencial.

b) A cierto valor umbral V_{TH} se produce un proceso de switching, que es esencialmente un repentino decrecimiento en la resistividad (conocido por estado ON).

c) Disminuye el voltaje, la corriente también decrece hasta que alcanza el valor 0.

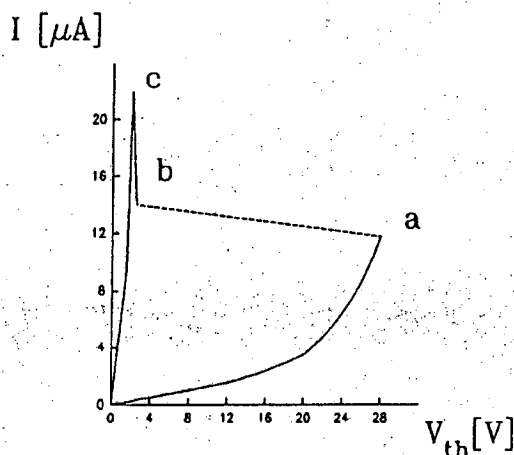


Fig. 1: Curva I-V característica del InSe.

*Becario del CONICET
**Investigador CONICET
***Investigador CIC

El fenómeno de switching ha sido estudiado por diferentes métodos y los mecanismos que lo determinan pueden ser tanto electrónicos¹ o térmicos². El objetivo del presente trabajo es iniciar un estudio de la correlación entre estas características y las interacciones hiperfinas de la sonda ^{111}Cd en este material. Si bien existen estudios realizados por otros grupos referentes a esta problemática³, los resultados reportados no admiten una explicación clara.

Se presentan aquí resultados obtenidos utilizando muestras poli y monocristalinas, en el rango de temperaturas desde RT a 520 °C, en experimentos tendientes a la caracterización hiperfina de la interacción del ^{111}Cd en la red cristalina del InSe, previo a someter a las muestras al paso de corriente.

II. EXPERIMENTAL

La técnica utilizada fue la de las correlaciones angulares perturbadas⁴. Se realizaron medidas sobre muestras policristalinas (obtenidas por fusión de los elementos puros, muestra I) y sobre monocristales (muestra II). Se llevaron a cabo los siguientes procedimientos para introducir los isótopos radioactivos en cada muestra:

1) Muestra I: Se depositó $^{111}\text{InCl}_3$ sobre una pequeña lámina de In, procediéndose al secado usando una lámpara infrarroja. Se agregó la cantidad adecuada de Se para obtener el InSe y se sometió la mezcla obtenida (en recipiente de cuarzo), a $p = 10^{-3}$ mbar de Ar. Luego de sucesivos lavados en Ar, se

procedió al sellado del tubo y se fundieron ambos materiales a 650 °C durante 24 hs.

2) Muestra II: Se depositó $^{111}\text{InCl}_3$ sobre el monocristal, secándose con lámpara infrarroja. Se procedió a la difusión de la actividad, en la misma atmósfera que la de la muestra I, en dos tratamientos sucesivos a 450° y 550 °C de 24 hs de duración cada uno. Para fijar la orientación del monocristal se desarrolló un receptáculo adecuado, dentro del cual se fijó la muestra en la atmósfera de Argón.

III. RESULTADOS

Muestra I.

Se realizaron medidas en atmósfera inerte a RT, 350 y 520 °C respectivamente. En la Fig. 2 se observan los espectros respectivos así como su transformada de Fourier. Es fácilmente identificable la presencia de una única interacción hiperfina cuyos parámetros están dados en Tabla I. La frecuencia cuadrupolar disminuye con el aumento de la Temperatura.

TM [°C]	ν [MHz]	η	δ [%]
RT	133,0 ₀	0,07 ₂	0,00 ₀
185	126,1 ₀	0,00 ₂	0,00 ₀
350	119,7 ₀	0,04 ₀	0,01 ₀
520	112,7 ₀	0,07 ₁	0,02 ₀

Tabla I. Parámetros ajustados del $^{111}\text{In}:\text{InSe}$.

Muestra II.

La Fig. 3 muestra espectros correspondientes a las medidas realizadas a temperatura ambiente, para diferentes orientaciones del monocristal respecto a los detectores. A fin de comparar los resultados obtenidos para ambas muestras, se realizaron medidas de diferentes orientaciones del monocristal respecto a los ejes de los detectores en el mismo rango de temperatura que para la muestra I. Si bien una interacción hiperfina, con los mismos parámetros que aquellos de la muestra I está presente, fueron nece-

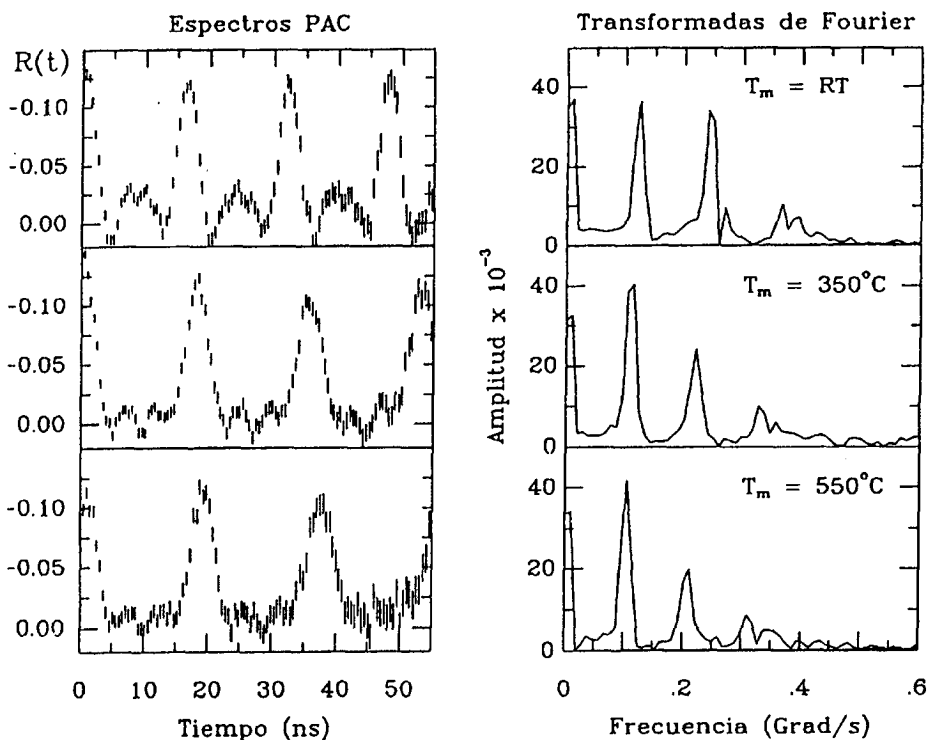


Fig. 2: Espectros PAC y los correspondientes espectros de Fourier obtenidos con una muestra InSe: ^{111}In policristalina a distintas temperaturas.

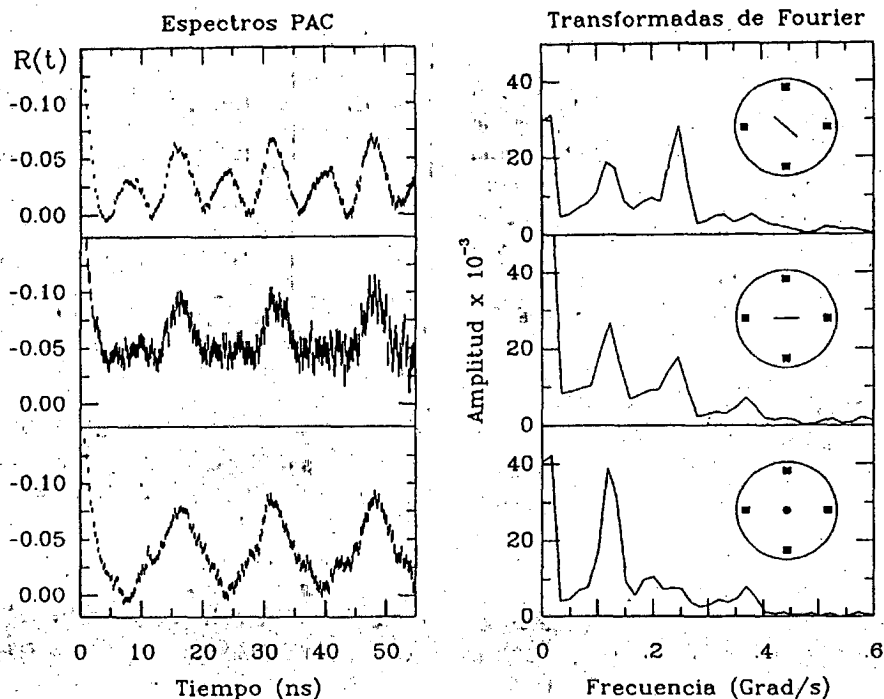


Fig. 3: Espectros PAC y las correspondientes transformadas de Fourier obtenidas con un monocristal de InSe: ^{111}In para distintas orientaciones del monocristal respecto de los detectores. Los círculos incluidos en las figuras destacan la dirección del eje c del cristal (línea o punto) respecto de los detectores (cuadrados) durante la medida.

sarías otras interacciones adicionales para poder ajustar los espectros.

IV. DISCUSIÓN

Como en In, que es el nucleído padre de la sonda nuclear utilizada, es un elemento que se encuentra en el compuesto estudiado como constituyente natural, es razonable suponer que los átomos sonda tiendan a ubicarse en sitios sustitucionales de catión de la estructura cristalina.

Para tener una estimación de la magnitud del gradiente de campo eléctrico (GCE) y su dirección en cada uno de los sitios de catión, se realizó un cálculo usando el simple modelo de cargas puntuales. En compuestos iónicos este modelo ha funcionado más o menos adecuadamente para describir las razones de los valores del GCE en diferentes sitios de la estructura cristalina, así como los valores del parámetro de asimetría. Para ello se tuvieron en cuenta dos especificaciones diferentes de la estructura cristalina (Ref. (5), graficada en Fig. 4, de aquí

en más E1 y Ref. (6), de aquí en adelante E2), que presentan dos sitios de catión diferentes.

Los resultados obtenidos mediante este cálculo se dan en la Tabla II. Como puede observarse, los valores de la componente principal de GCE se encuentran aproximadamente en una relación 1:1 para

estruc.	Sitio	V_{zz} [10^{20} V/m^2]	η	dirección del eje Z
E1	1	2.906	0	eje c del cristal
	2	2.933	0	eje c del cristal
E2	1	0.638	0	eje c del cristal
	2	0.820	0	eje c del cristal

Tabla II. Resultados del cálculo de GCE para los sitios de catión de las estructuras E1 y E2 usando el modelo de cargas puntuales.

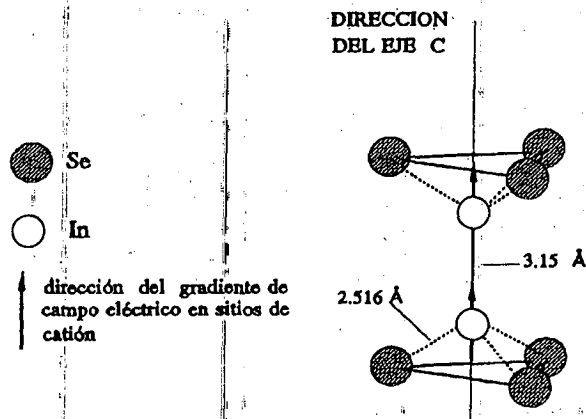


Fig. 4: Entorno local de átomos de In para el InSe de acuerdo con ref. (6).

la descripción E1 y 0.8 para E2. Para los dos sitios, tanto en una como en otra descripción ésta apunta a lo largo del eje *c* del cristal, y el parámetro de asimetría toma el valor $\eta=0$.

Comparando estos resultados con los obtenidos en las medidas, podemos concluir que el hecho de haber observado una sola interacción con $\eta=0.00\pm 0.01$ está indicando un mejor acuerdo con la descripción E1.

Como es sabido, las medidas PAC en monocristales permiten determinar experimentalmente el sistema de ejes principales del tensor GCE. Los espectros que se observan en la Fig. 3 indican que la dirección del eje *z* (definido de tal manera que el autovalor del tensor GCE correspondiente sea el mayor de los tres autovalores) coincide con la línea que une detectores opuestos, estando entonces ubicada a lo largo de la dirección del eje cristalino *c*, como fue anticipado por el cálculo realizado con ambas especificaciones de la estructura.

En cuanto al decrecimiento observado de la

constante de acoplamiento con la temperatura está en acuerdo con los resultados de Amaral *et al.*³ y no puede ser explicado únicamente por la dilatación de red. Como se discute en Ref. (3), este comportamiento puede ser atribuido a la influencia de vibraciones de red.

V. CONCLUSIONES

- Se ha logrado determinar la interacción cuadrupolar característica de núcleos ¹¹¹Cd en el semiconductor InSe.

- Los resultados están de acuerdo con la descripción de la estructura dada en E1, siendo el GCE en los dos sitios de la estructura de la misma magnitud (dentro del error experimental) y apuntando en la dirección del eje *c* del cristal.

- La caracterización realizada se amplió mediante un estudio de la dependencia con la temperatura de la interacción cuadrupolar.

- Los próximos pasos a seguir son realizar mediciones de las muestras sometidas a corrientes en distintos tramos de la curva I-V.

REFERENCIAS

1. A. E. Owen and J. M. Robertson, IEEE Trans. Electron Devices **20**, 105-22 (1973).
2. A. C. Warren, IEEE Trans. Electron Devices **20**, 123-31(1973).
3. L. Amaral, M. Behar, A. Maciel, and L. S. de Oliveira, Phys. Lett. **102A**, 1-2, 45 (1984).
4. Ver, por ejemplo, H. Fruenfelder y R. M. Steffen en *Alpha, Beta and Gamma Ray Spectroscopy*, editado por K. Siegbahn (North-Holland, Amsterdam, 1967), pp 967 y 1182.
5. R. W. Wyckoff, *Crystal Structures* (Interscience, New York, 1968) Vol. 1, p. 145.
6. A. Likforman, D. Carré, J. Etienne and B. Bachet, Acta Cryst. **B31**, 1252 (1975).