

# Variación con la temperatura de los parámetros de red y los coeficientes de expansión térmica de la aleación $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$ . Una estructura pseudocúbica.

## Temperature Variation of lattice parameters and thermal expansion coefficients of the alloy $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$ . Pseudocubic structure.

Correa Pizano, Ana<sup>1</sup>; Lacruz, María Alejandra<sup>2</sup>; Sánchez, María Angélica <sup>2</sup>; Caldera, Dayana<sup>1</sup>; Quintero, Miguel <sup>1</sup>; Marín, Giovanni<sup>3</sup>; Morocoima, Manuel <sup>1\*</sup>.

<sup>1</sup>Centro de Estudios de Semiconductores, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

<sup>2</sup>Laboratorio de Espectroscopía Analítica, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

<sup>3</sup>Millennium Institute for Research in Optics (MIRO), Laboratorio de Nanosíntesis, Universidad Santiago de Chile. [\\*morocoima@gmail.com](mailto:morocoima@gmail.com)

### Resumen

Se realizaron mediciones de difracción de rayos-X en polvo a la muestra  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$ , una aleación semiconductor de tipo I-III-VI<sub>2</sub>, en el rango de temperatura entre 311 K y 780 K, región en la que este material tiene una estructura tetragonal  $\overline{142d}$ , y relación  $c/a=2$ , por lo que se analizó como una estructura pseudocúbica. A partir del análisis de las líneas de difracción de rayos-X, se determinaron los valores precisos de los parámetros de la red en función de la temperatura. Esos resultados permitieron evaluar los coeficientes de expansión térmica de los parámetros correspondientes. Se encontró que los coeficientes de expansión térmica de los parámetros cristalográficos  $a$  y  $c$ , así como las distancias catión-anión,  $d_{\text{Cu-S}}$  y  $d_{\text{In,Ga-S}}$ , eran todos iguales. Estos resultados están en concordancia con lo propuesto por L. Garbato et al., 1987, sobre la estabilidad de las estructuras de la familia I-III-VI<sub>2</sub>, en comparación con las familias del tipo II-III<sub>2</sub>-VI<sub>4</sub>.

**Palabras clave:** Semiconductores, parámetros de red, Difracción de Rayos-X, Dilatación Térmica, Coeficiente de dilatación.

### Abstract

X-ray powder diffraction measurements on  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$ , a I-III-VI<sub>2</sub> semiconductor alloy, were made in the temperature range between 311 K to 780 K, a region in which this material has a tetragonal structure  $\overline{142d}$ , and ratio  $c/a=2$ , so it was analyzed as a pseudocubic structure. From the analysis of the X-ray diffraction lines, accurate lattice parameters values were determined as function of temperature. These results allowed the evaluation of the thermal expansion coefficients of the corresponding parameters. The expansion coefficients of the crystallographic parameters  $a$  and  $c$ , as well as the cation-anion distances,  $d_{\text{Cu-S}}$  and  $d_{\text{In,Ga-S}}$ , were found to be all the same. These results are in good agreement with the proposed by L. Garbato et al., 1987, on the stability of the structures of the I-II-VI<sub>2</sub> family, compared to the type II-III<sub>2</sub>-VI<sub>4</sub> families.

**Keywords:** Semiconductors, cell parameters, X-ray diffraction, Thermal expansion, Expansion coefficient.

## 1 Introducción

Un gran número de compuestos semiconductores y sus aleaciones han sido estudiados en los últimos 80 años, y estos estudios no cesan, dada la importancia que el estudio de las propiedades físicas de estos materiales (estructurales, ópticas, magnéticas, térmicas, etc.) tienen en el desarrollo de dispositivos electroópticos utilizados en la creciente revolución electrónica que experimenta la sociedad actual. Inicialmente se estudiaron los semiconductores básicos o elementales, (Si, Ge), posteriormente los compuestos binarios, ternarios y sus aleaciones, todos derivados de los anteriores y que cumplen con la regla de Grimm – Sommerfeld (Grimm y Sommerfeld, 1926) de cuatro electrones promedio por átomo.

Cabe destacar que la mayoría de estos materiales semiconductores presentan estructuras parecidas a la del Si, y este a su vez es descrito en función de la estructura del diamante, razón por la cual reciben el nombre de estructuras tipo diamante o diamantinas.

En el caso particular de materiales del tipo I-III-VI<sub>2</sub>, han sido estudiados por muchos autores, Shay y Wernick (J.L. Shay y J.H. Wernick, 1975), Deb y Zunger (S.K. Deb y A. Zunger, 1987), Coutts (T. Coutts y col., 1968), Miller (A. Miller y col., 1981), por lo que la información sobre sus propiedades físicas es amplia, aunque en cuanto a la variación con la temperatura de sus parámetros cristalográficos y los respectivos coeficientes de dilatación, la información es escasa, esto justifica por razones académicas y tecnológicas el estudio de los mismos. Entre estos materiales se encuentran el CuInS<sub>2</sub> y el CuGaS<sub>2</sub>, sus estructuras han sido reportadas por Abrahams y Bernstein (S.C. Abrahams and J.L. Bernstein, 1973), Garbato et. Al. (L. Garbato y col., 1987), Yamamoto y Miyauchi (Yamamoto y Miyauchi, 1972), entre otros. La importancia de estos compuestos se debe a que son los extremos de la aleación CuIn<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>S<sub>2</sub>, en la cual se encuentra nuestra muestra de estudio, con x=0-5 de concentración.

Cuando las estructuras cristalinas de los compuestos extremos, de una determinada aleación, son muy parecidas, es decir los grupos espaciales y los parámetros de red, las aleaciones generalmente presentan un amplio rango de solución sólida, o en todo el rango de composición, en el que los parámetros de red, la brecha fundamental de energía y otros parámetros físicos, varían suavemente con la composición. De tal manera que se puede seleccionar una determinada composición, con parámetros adecuados útiles en determinada aplicación tecnológica. Así, este hecho potencia el rango en aplicaciones de dispositivos electromagnéticos y ópticos (M. Quintero y col., 1986, E. Moreno y col., 2021).

## 2 Detalles experimentales

La muestra de CuIn<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>S<sub>2</sub> fue preparada por la técnica de síntesis y recocido, se preparó un gramo (1 g) de muestra. Para esto se depositan en una cápsula de cuarzo las cantidades previamente pesadas de los elementos para formar la estequiometría requerida. Posteriormente la cápsula es sellada al vacío y colocada en un horno para su posterior fundición y recocido. Para la fundición el horno es llevado hasta una temperatura de 1150 °C aproximadamente, a esta temperatura se deja por 2 horas, luego se enfría a una tasa de 100 °C por día, hasta alcanzar la temperatura de 500 °C; a esta temperatura se dejó por 50 días, lo que constituyó el recocido. El diagrama de fases del sistema CuIn<sub>1-z</sub>Ga<sub>z</sub>S<sub>2</sub> (Bodnar, 1981) reporta que para esta concentración en particular y a esa temperatura la muestra exhibe una estructura tetragonal  $\bar{1}\bar{4}2d$ . Luego de ese tiempo la muestra se enfrió lentamente hasta temperatura ambiente. Con este procedimiento se buscaba que la muestra alcanzara su equilibrio termodinámico, es decir, que cada átomo ocupará su posición ideal dentro de la estructura cristalina. Estas condiciones de equilibrio termodinámico se determinaron usando una cámara de rayos-X de Guinier a temperatura ambiente, las líneas delgadas del patrón indicaron que alcanzó este estado, las muestras obtenidas con este método son del tipo policristalino.

El patrón de rayos-X para este estudio se obtuvo usando una cámara Guinier-Lerner de altas temperaturas, en el rango de temperaturas entre 311 K y 997 K, con una velocidad de barrido de 2 mm/h, durante 40h. La radiación utilizada fue la del Cu K $\alpha^*$  (Cu K $\alpha^*$  = 1.5418 Å). Los ángulos de Bragg fueron corregidos utilizando NH<sub>4</sub>Br como material estándar (Mc Murdie. H.F y col. 1986). Para los efectos del presente estudio, se trabajó el intervalo de temperatura entre 311 K y 780 K. Las regiones por encima de 780 K se presentarán en un trabajo posterior.

En toda la región estudiada, la aleación muestra una estructura tetragonal del tipo  $\bar{1}\bar{4}2d$ . Se calcularon los valores de los parámetros de red, *a* y *c*, a diferentes temperaturas utilizando el método de mínimos cuadrados juntos con todas las líneas de difracción que podían ser claramente medidas a partir del patrón difracción de rayos-X en función de la temperatura. La precisión en la determinación de los parámetros *a* y *c*, se estimó en  $\pm 0,001$  Å y  $\pm 0,005$  Å, respectivamente.

## 3 Resultados, análisis y discusión.

El patrón de difracción de Rayos-X obtenido de la cámara de Guinier-Lernne, para la muestra CuIn<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>S<sub>2</sub>, fue analizado de forma general en todo el rango de temperatura tomado para el presente estudio, desde 311 K hasta 780 K. En la región estudiada del patrón, se observan claramente las líneas de difracción que corresponden a una estructura tetragonal con grupo espacial  $\bar{1}\bar{4}2d$ , tal como lo reportaron Abrahams y Bernstein (S.C. Abrahams and J.L. Bernstein, 1973) y Garbato et. Al. (L. Garbato y col., 1987)

De esta manera, el patrón de Rayos-X fue indexado y los parámetros de la red determinados de la manera usual, en el rango de temperatura indicado, 311 K-780 K. Cabe destacar que estas medidas de difracción de Rayos-X en función de la temperatura se realizan a tubo abierto, por lo que hay pérdida de masa, y en nuestro tipo de muestra se presenta en pérdida de los aniones (S) con el aumento de la temperatura.

Del patrón de difracción se observa que, las líneas de estructura (200/004), (220/204) y (312/116) no presentan separación entre ellas, lo que indica que la relación  $c/a$  se mantiene igual a 2 en todo el rango de temperatura estudiado, (M. Morocoima y M. Quintero, 2005) lo cual está en concordancia con la información extraída del trabajo de Yamamoto y Miyauchi (Yamamoto y M

iyachi, 1972). El hecho de que  $c/a=2$  nos indica que no existe distorsión de la celda tetragonal en todo el rango de temperatura estudiado, esto es, la estructura se mantiene como una estructura pseudocúbica, del tipo blenda de zinc, para todo el rango de temperatura.

Otra información importante que se extrajo del patrón de difracción de rayos-X, es la referente a la línea (103) está presente en todo el rango de temperatura, esta línea de difracción no es una línea de estructura, es una línea que aparece debido al ordenamiento de los cationes, Cu, In-Ga, en la subred catiónica de la estructura, lo que nos indica que en todo el rango de temperatura estudiado, los cationes permanecen ordenados en la subred catiónica.

Los parámetros de la red se determinaron para cada temperatura de la manera descrita anteriormente, para 311 K esos valores fueron  $a = 5.411 \text{ \AA}$  y  $c = 10.821 \text{ \AA}$  estos valores son muy cercanos a los reportados (Yamamoto y Miyauchi, 1972).

En el caso particular del material  $\text{CuInS}_2$  y el  $\text{CuGaS}_2$ , Abrahams y Bernstein (S.C. Abrahams and J.L. Bernstein, 1973), reportan que ambos presentan grupo espacial  $I\bar{4}2d$  y parámetros  $a=5.522 \text{ \AA}$  y  $c=11.132 \text{ \AA}$ , con  $c/a=2.016$  y  $a=5.347 \text{ \AA}$  y  $c=10.474 \text{ \AA}$ , con  $c/a= 1.959$  respectivamente; Garbato et. Al. (L. Garbato y col., 1987), también reporta que el grupo espacial es  $I\bar{4}2d$  y los parámetros de red  $a=5.523 \text{ \AA}$ ,  $c=11.123 \text{ \AA}$ , con  $c/a= 2.014$ , y  $a=5.356 \text{ \AA}$  y  $c=10.433 \text{ \AA}$ , con  $c/a= 1.948$  respectivamente.

Al ser ambos grupos espaciales iguales y los parámetros de red muy parecidos, se espera que haya una solución sólida a lo largo de todo el rango de composición del sistema de aleaciones  $\text{CuIn}_y\text{Ga}_{1-y}\text{S}_2$  y que los parámetros cristalográficos varíen suavemente con la composición (Vegard, L. 1921).

Se observa de ambos reportes que la relación  $c/a$  va desde 1.948 del  $\text{CuGaS}_2$  (L. Garbato y col., 1987), hasta 2.016 del  $\text{CuInS}_2$  (S.C. Abrahams and J.L. Bernstein, 1973), lo que nos sugiere que en el sistema de aleaciones  $\text{CuIn}_y\text{Ga}_{1-y}\text{S}_2$ , el valor de  $c/a$  pasará por el valor de 2 para alguna concentración en particular. Esto lo corroboró Yamamoto y Miyauchi (Yamamoto y Miyauchi, 1972), en cuyo trabajo reportan la variación de los parámetros de red para la aleación  $\text{CuIn}_y\text{Ga}_{1-y}\text{S}_2$ , y aunque no reportan la

concentración  $y=0.5$ , estudiada en este trabajo, de la variación que presentan se extrae que los parámetros de la red para la composición en estudio en particular deben ser,  $a=5.4154 \text{ \AA}$  y  $c=10.829 \text{ \AA}$ , de donde obtenemos que la relación  $c/a=2$ , lo que es consistente con nuestro trabajo. La variación de los parámetros de la red  $a$  y  $c$  con la temperatura se muestran en las Fig. 1 y 2 respectivamente. Se observa de estas gráficas que los parámetros de red  $a$  y  $c$  aumentan con la temperatura de manera no lineal. Se encontró que, dentro de los límites del error experimental, las variaciones de  $a$  y  $c$  pueden ser descritos o ajustados a un polinomio de segundo grado; las ecuaciones obtenidas para estos parámetros son:

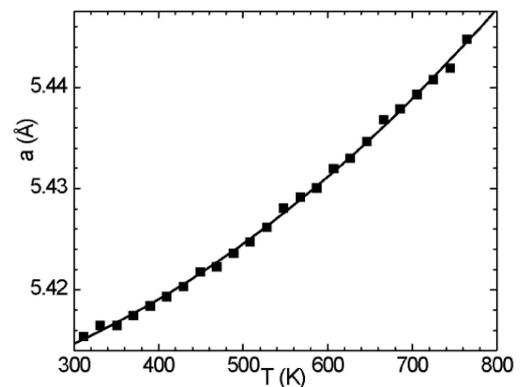


Fig. 1. Variación del parámetro  $a$  con la temperatura para la aleación  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$ . Los cuadros representan los valores experimentales y la línea continua el ajuste polinomial.

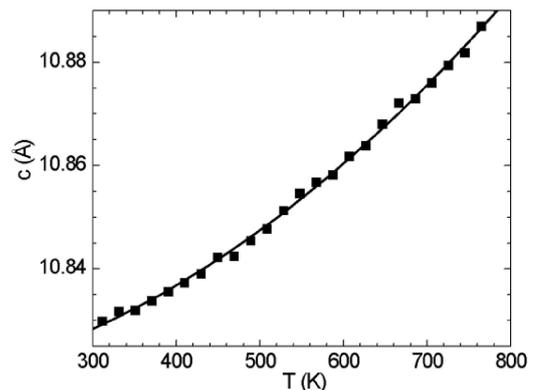


Fig. 2. Variación del parámetro  $c$  con la temperatura para la aleación  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$ . Los cuadros representan los valores experimentales y la línea continua el ajuste polinomial.

$$a(T) = 5.4084 + 4.156 \cdot 10^{-6}T + 5.624 \cdot 10^{-8}T^2 \quad (1)$$

$$c(T) = 10.8165 + 5.551 \cdot 10^{-6}T + 1.124 \cdot 10^{-7}T^2 \quad (2)$$

con una desviación standard con respecto a los experimentales de  $\pm 0.0004 \text{ \AA}$  y  $\pm 0.0009 \text{ \AA}$ , respectivamente. Esos ajustes se muestran como líneas sólidas en las respectivas gráficas de  $a$  y  $c$ . Estas ecuaciones se usaron para calcular el volumen,  $V$ , y la densidad de Rayos-X,  $D_x$ , como función de la temperatura, los cuales están representadas en la Fig. 3. Se observa de esta figura que, el volumen aumenta con la temperatura mientras que la Densidad de Rayos-X disminuye con ésta.

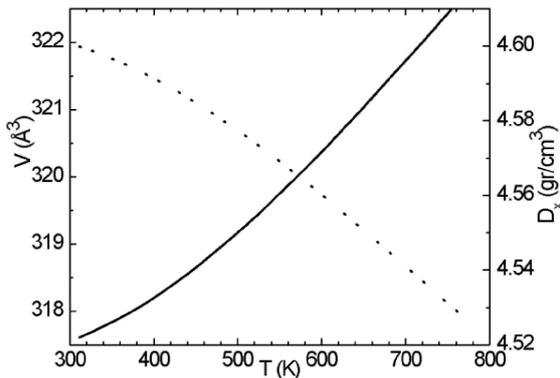


Fig. 3. Variación con la temperatura del volumen,  $V$ , línea sólida, y de la densidad de rayos-X,  $D_x$ , línea punteada, para la aleación  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$

En general, el coeficiente de expansión térmica  $\alpha_P^T$  del parámetro cristalino  $P$  a la temperatura  $T$  está dado por (M. Quintero, y col., 1994, M. Morocoima, y col., 1997),

$$\alpha_P^T = \frac{1}{P_0} \frac{dP}{dT} \quad (3)$$

donde  $P_0$  es el valor del parámetro a 311 K que es la temperatura más baja medida.

Es importante aclarar antes que, dado que la estructura de la muestra analizada exhibe un comportamiento pseudocúbico, la podemos considerar como dos estructuras cúbicas una sobre la otra. Al presentar este comportamiento, una información que aporta es que las energías de enlace (Cu-S, Ga, In-S) son iguales en todas las direcciones principales del cubo, lo que es lo mismo, el campo cristalino que ven los electrones al moverse en cualquier dirección principal del cubo es el mismo. La distorsión tetragonal,  $\delta = 2 - c/a$ , está asociada al campo cristalino que pueden ver los electrones en el cristal. Dado que  $c/a = 2$ , esta distorsión tetragonal se hace igual a cero y el campo cristalino es homogéneo en todas las direcciones principales del cristal.

Así pues, al tener la variación del parámetro " $a$ " con la temperatura, ya tenemos la correspondiente variación del parámetro " $c$ " con ésta, por lo que es necesario conocer sólo

el coeficiente de dilatación del parámetro " $a$ ", que debe ser igual al del parámetro " $c$ ".

De esta información,  $c/a = 2$ , también podemos inferir que la posición del anión, S, está a un cuarto de la diagonal principal del cubo y que permanece invariante en todo el rango de temperatura, y el coeficiente de dilatación de la distancia catión-anión es el mismo que el del parámetro " $a$ ", todo esto está de acuerdo con lo propuesto por Garbato (L. Garbato y col., 1987) para compuestos I-II-VI<sub>2</sub> con distorsión tetragonal igual a cero. En los casos de materiales I-III-VI<sub>2</sub> con distorsión tetragonal alta y materiales de la familia II-III<sub>2</sub>-VI<sub>4</sub>, la estabilidad térmica está muy ligada a esta distorsión de la red, mientras más alejado esté el anión de su posición ideal de 1/4 de la diagonal principal del cubo, mayor es la inestabilidad térmica.

Entonces utilizando las relaciones (1) y (3) obtenemos:

$$\alpha_P^T = \frac{P_1 + 2P_2T}{P_0} : P_0 = P(311K) \quad (4)$$

La ecuación para el coeficiente de dilatación térmica del parámetro de la red " $a$ ", que se obtuvo usando la relación (4) y (1) es:

$$\alpha_a(T) = 7.6850 \cdot 10^{-7} + 2.0798 \cdot 10^{-8}T \quad (\text{K}^{-1}) \quad (5)$$

Este resultado se muestra en la Fig. 4, de esta observamos que el coeficiente de dilatación  $\alpha_a$ , aumenta con la temperatura de manera lineal.

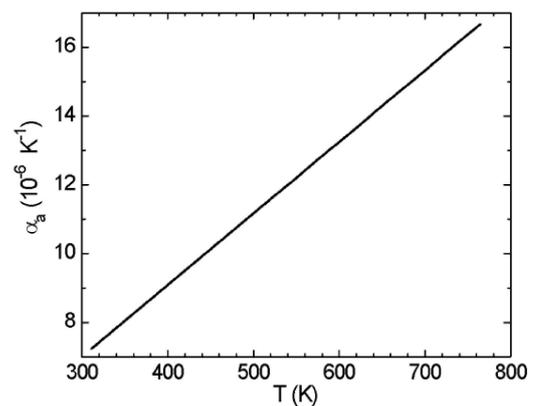


Fig. 4. Variación con la temperatura del coeficiente de dilatación  $\alpha_a$ , para la aleación  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$

Como se indicó anteriormente, al presentar la estructura un comportamiento pseudocúbico, el anión S encontrará en su posición ideal en el cubo, es decir, a 1/4 de la diagonal principal del cubo, esto es:

$$\chi = \frac{\sqrt{3}}{4} a \quad (6)$$

Y, en este caso, ésta será también la distancia catión-anión. La variación con la temperatura de la distancia catión-anión, se muestra en la Fig. 5.

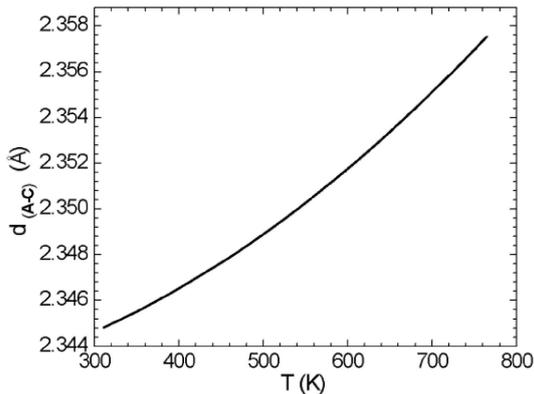


Fig. 5. Variación con la temperatura de la distancia Cation-Anión,  $d_{\text{Cu-S}}=d_{\text{Ga,In-S}}$ , para la aleación  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$

#### 4 Conclusiones

Se encontró que en el rango de temperatura entre 311 K y 780 K la estructura del  $\text{CuIn}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{S}_2$  es tetragonal, con  $c/a=2$ , lo que implica la ausencia de una deformación de la red cristalina, tal como lo propusieron L. Garbato y col., 1987, para estructuras tetragonales de las familias I-II-VI<sub>2</sub> y con  $c/2a \sim 1$ , a diferencia de lo que sucede con las estructuras del tipo II-II<sub>2</sub>-VI<sub>4</sub>, denominadas tetragonales con defecto.

Los parámetros  $a$  y  $c$  de la celda unitaria aumentan de manera no lineal con la temperatura, estas variaciones se ajustaron a polinomios de segundo grado con la temperatura. Al mantenerse la relación  $c/a=2$  en todo el rango de temperatura, podemos describir la estructura tetragonal, con grupo espacial  $I\bar{4}2d$ , como una estructura pseudo cúbica, es decir, como dos estructuras cúbicas, del tipo zincblenda, una sobre la otra a lo largo del eje  $z$ , y los coeficientes de dilatación a lo largo de las direcciones principales  $a$  y  $c$ , son iguales.

Es de notar que la línea de orden (ordenamiento de cationes en la subred) (103) está presente en todo el rango de temperatura estudiado, lo que implica que el grado de orden de los cationes cambia poco con  $T$ .

Este tipo de materiales son potencialmente utilizables en la fabricación de celdas solares, dada la estabilidad de la estructura cristalina con la temperatura.

#### Referencias

- Abrahams S.C. and J.L. Bernstein, (1973) piezoelectric nonlinear optic  $\text{CuGaS}_2$  and  $\text{CuInS}_2$  crystal structure: Sublattice distortion in  $A^{\text{I}}B^{\text{III}}C_2^{\text{IV}}$  and  $A^{\text{II}}B^{\text{IV}}C_2^{\text{V}}$  type chalcopyrites. *J. Chem. Phys.* 59, pp 5415-5422
- Bodnar I.V. (1981), "Growth and properties of solid solution  $\text{CuGa}_x\text{In}_{1-x}\text{S}_2$ ". Translated from *Izv. Akad. Nauk SSSR, Neorg. Mater.*, 17 No. 4, pp. 583-587
- Coutts T., L Kazmerski Y S. Wagner, (1986), *Solar Cells*; vol. 16; pp. 1 -640, vol., dedicado íntegramente al  $\text{CuInSe}_2$  y su aplicación a células solares, más de 40 trabajos dedicados a producción, caracterización y dispositivos
- Deb S.K. and A. Zunger, (1987) Ternary and Multinary Compounds, "Proceedings of the 7th International Conference". Materials research Society, Colorado, NREL
- Garbato L., F. Ledda and Rucci, (1987), Structural distortions and polymorphic behaviour in  $abc_2$  and  $ab_2c_4$  tetrahedral compounds, *Prog. Crystall Growth and Charact.* 15, pp. 1-41
- Grimm H.G.; Sommerfeld, A (1926). "Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit den chemischen Valenzahlen". *Zeitschrift für Physik.* 36 (1), pp. 36-59
- Miller A., A. Mackinnon and D. Weaire, (1981) Beyond the Binaries The Chalcopyrite and Related Semiconducting Compounds, *Sol. Sta. Pys.* 36, pp. 119-175
- Moreno E., M. Quintero, M. A. Villarreal, E. Quintero, M. Morocoima, G. E. Delgado, J. Contreras, M. Chourio, (2021) Estudio estructural y diagrama de fases del sistema de aleaciones  $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-z}\text{Mn}_z\text{SnSe}_4$  *Rev. LatinAm. Metal. Mat.* 41 (1), pp. 50-59
- Morocoima M., M. Quintero, E. Guerrero, R. Tovar and P. Conflant, (1997) "Temperature variation of the lattice parameters and thermal expansion coefficients of the compound  $\text{ZnGa}_2\text{Se}_4$ .", *J. Phys. Chem. Sol.* 58, 3, pp. 503-507
- Morocoima Manuel y Miguel Quintero, (2005) Determinación de la composición de muestras de la aleación  $\text{Zn}_{1-z}\text{Mn}_z\text{Ga}_2\text{Se}_4$  mediante medida del desdoblamiento angular de las líneas de estructura, *CIENCIA* 13(2), pp. 205-210
- Murdie Mc., H.F., Morris, M.C., Evans, E.H., Paretzkin, B., Wong, W. (1986), Ettliger, L.D. and Hubbard, C.R. Standard X-Ray Diffraction Powder Patterns from the JCPDS Research Associateship. *Powder Diffraction*, 1, pp. 64-77
- Quintero M, Dierker L, Woolley JC. (1986), Crystallography and optical energy gap values for  $\text{Cd}_{2x}(\text{CuIn})_y\text{Mn}_{2z}\text{Te}_2$  alloys, *J. Sol. Stat. Chem.* 63, pp. 110-117

- Quintero M., M. Morocoima, E. Guerrero and J. Ruiz, (1994), " Temperature variation of the lattice parameters and thermal expansion coefficients of the compound MnGa<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>.", Phys. Stat. Sol. (a) 146, 2, pp. 587-593
- Shay J.L. y J.H. Wernick, (1975) Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronics Properties and Applications, 5ed. OXFORD, Pergamon press.
- Vegard L. (1921), Die Konstitution der mischkristallen und die raumfüllung der atome. Z. für Physik, 5, pp. 17-26
- Yamamoto y Miyauchi, 1972, tomado de: J.L. Shay y J.H. Wernick, (1975) Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronics Properties and Applications, 5ed. OXFORD, Pergamon Press.

**Recibido:** 10 de diciembre de 2024

**Aceptado:** 15 de marzo de 2025

**Correa Pizano, Ana.** Licenciada en Física, 2009, Centro de Estudios de Semiconductores, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

Correo: [pisanoanita@gmail.com](mailto:pisanoanita@gmail.com)

 <https://orcid.org/0009-0000-2215-1991>

**Lacruz Páez, María Alejandra.** Licenciada en Química, 2006, Magister en Química Aplicada, Opción Nuevos Materiales, 2009, Profesora Asistente, Laboratorio de Espectroscopía Analítica, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

Correo: [alejandra030707@gmail.com](mailto:alejandra030707@gmail.com)

 <https://orcid.org/0009-0001-5888-2160>

**Sánchez, María Angélica.** Licenciada en Química, 1996 y Dra en Química Analítica 2010. Coordinadora del Laboratorio de Espectroscopía Analítica. Profesora Asociada del Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

Correo: [angelisa@ula.ve](mailto:angelisa@ula.ve)

 <https://orcid.org/0009-0003-0126-0007>

**Caldera, Dayana.** Licenciada en Física, 2004, Doctora en Química Aplicada, Opción Nuevos Materiales, 2011, Profesora Asistente, Centro de Estudios de Semiconductores, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

Correo: [calderad@gmail.com](mailto:calderad@gmail.com)

 <https://orcid.org/0009-0005-9702-4643>

**Quintero, Miguel.** Licenciado en Física por la Universidad de Los Andes y PhD en Física, por la Universidad de Ottawa, Canadá en 1985. Su investigación se enfoca en el estudio de nuevos materiales semiconductores, síntesis, caracterización, diagramas de fases, propiedades térmicas, eléctricas, ópticas y magnéticas. Profesor Titular, e Investigador del Centro de Estudios de Semiconductores (CES-ULA), Departamento de Física, facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela.

Correo: [marparra61@gmail.com](mailto:marparra61@gmail.com)

 <https://orcid.org/0009-0001-5468-2196>

**Marín, Giovanni.** Licenciado en Física por la Universidad del Zulia. MSc y Dr. en Química Aplicada, en la Opción de Nuevos Materiales, PIQA, Universidad de Los Andes. Su investigación se enfoca en el estudio de nuevos materiales semiconductores, propiedades eléctricas y ópticas. Adscrito al Millennium Institute for Research in Optics (MIRO), Laboratorio de Nanosíntesis, Universidad Santiago de Chile

Correo: [gmarin29@gmail.com](mailto:gmarin29@gmail.com)

 <https://orcid.org/0000-0002-1909-7370>

**Manuel Morocoima,** Licenciado en Física, MSc y Dr. en Química Aplicada, en la Opción de Nuevos Materiales, miembro del Centro de Estudios de Semiconductores, (Director), Profesor Titular del Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Venezuela. Línea de investigación: Semiconductores Magnéticos. Caracterización estructural y propiedades ópticas, térmicas y magnéticas de semiconductores magnéticos.

 <https://orcid.org/0000-0003-3571-5906>