

INTERDIFUSION EN PELICULAS DE $Hg_{1-x}Cd_xTe$ SOBRE CdTe

A.B. Trigubo y N.E. Walsoe de Reca

*Programa de Investigación en Sólidos (PRINSO), Centro de Investigaciones Científicas
y Técnicas de las Fuerzas Armadas (CITEFA-CONICET),
Zufriategui, 1603 Villa Martelli Buenos Aires.*

Se crecen películas de $Hg_{1-x}Cd_xTe$ (MCT) con $x=0,2$ por la técnica de VPE (epitaxia en fase vapor) sobre CdTe orientado (111)Te, (111)Cd, (110) y (110), en un rango de temperaturas $(593 \pm 1)^\circ C < T < (615 \pm 1)^\circ C$ con una sobrepresión de Hg de 1,9atm. Los "Films" se caracterizaron estructural y eléctricamente. Los perfiles de difusión (concentración) fueron analizados con microsonda electrónica y la distribución de dislocaciones fue estudiada sobre planos de clivaje {110}. Los coeficientes de interdifusión fueron medidos con dos métodos diferentes. Se estudió la distribución de los agujeros hallados en la interfase de algunos crecimientos y se discuten las causas de su aparición.

I. INTRODUCCION

El MCT es, sin duda el mejor detector de radiación infrarroja conocido hasta el presente. Sin embargo, existen todavía dificultades para la fabricación en gran escala de los detectores de IR a partir del material pasivo. En consecuencia se emplean varias técnicas de crecimiento para obtenerlo en láminas delgadas. El CdTe es el sustrato sobre el cual se depositan los "films" de MCT. El crecimiento sobre {111} y (100) ha sido investigado por varios autores^{1,4}. En ambos casos, los efectos del maclado del CdTe fueron frecuentemente observados, ya que las maclas se ordenan en bandas paralelas sobre {111} e interceptan el (100) y luego se propagan en el crecimiento epitaxial.

El objeto de este trabajo fue crecer epitaxialmente el MCT ($x=0.2$) sobre CdTe monocristalino con diferentes orientaciones cristalográficas, caracterizar los "films" y estudiar los parámetros que afectan el proceso de interdifusión.

II. PARTE EXPERIMENTAL

a) MATERIALES

El CdTe, el HgTe y el MCT tienen estructura blanda de cinc y pertenecen al grupo espacial cúbico no centrosimétrico F43m con $a(CdTe) = 6.48$ Å [5] y $a(HgTe) = 6.46$ Å [5], con una diferencia de parámetro de red de 0.3%, lo que favorece el crecimiento epitaxial del MCT. Estos materiales presentan polaridad cristalográfica sobre {111} y en las direcciones $\langle 111 \rangle$.

Monocristales de CdTe (II-VI Inc. USA), con orientaciones cristalinicas (111)Te, (111)Cd, (110) y (110), de 1 cm de lado y 0.1 cm de espesor se cortaron en mitades con sierra de hilo, se pulieron mecánicamente con alúmina de 1 μm y mecánico-

quimicamente con Br₂(2%)-metanol. La orientación cristalina se determinó por difracción de rayos X (técnica de Laue). Las muestras se atacaron⁶ con solución EAg-1 para evaluar la densidad de dislocaciones ($\approx 5 \cdot 10^5$ cm⁻²) y la desorientación entre subgranos ($\theta \approx 20''$). La morfología de las figuras de corrosión fue observada con microscopias óptica (MO) y electrónica de barrido (MEB), determinándose unívocamente las diferencias entre los planos (111) Te y (111) Cd atacados con EAg-1, los efectos de la polaridad en la estructura y las formas particulares de las figuras de corrosión sobre los diferentes planos⁶.

Las muestras fueron caracterizadas eléctricamente con medidas de efecto Hall a 77K mostrando una alta resistividad ($\sim 1 M\Omega$) y una densidad media de portadores: $n = 10^{17}$ cm⁻³. El equipo de efecto Hall fue construido en el PRINSO⁷.

b) TECNICA DE CRECIMIENTO

La epitaxia en fase vapor (VPE) fue elegida para crecer el MCT con $x=0.2$ sobre sustratos de CdTe con HgTe como fuente. Se empleó el sistema usual de ampolla de cuarzo^{1,3} con un rango de temperatura entre 593 C y 615 C ($\Delta T = \pm 1^\circ C$), con una temperatura de Hg de $(404 \pm 1)^\circ C$ lo que da una sobrepresión⁸ de Hg 1.9 atm., una separación sustrato-fuente entre 0.2 cm y 0.4 cm, un tiempo de crecimiento de 24 horas y una velocidad de crecimiento variable entre 1.9 y 3.3 $\mu m/h$.

c) CARACTERIZACION DE LOS "FILMS"

La morfología superficial de los "films" fue estudiada con MO y MEB. La excelente coincidencia de orientación sustrato/MCT fue determinada por la técnica de Laue. La homogeneidad de la com-

posición fue comprobada con la microsonda electrónica Edax computarizada del MEB Philips 505, empleando el programa Quant para analizar los resultados. Para determinar los perfiles de difusión las muestras fueron clavadas sobre uno de los planos de clivaje {110}, el que fue elegido en cada caso perpendicular a la superficie del sustrato. La variación de composición sobre los perfiles fue evaluada con la micro sonda electrónica. La morfología de las figuras de corrosión y la densidad y distribución de éstas, fue revelada por ataque químico con solución Polisar 2 y se observaron con MEB.

Las mediciones eléctricas (efecto Hall a 77K) permitieron evaluar la calidad de los "films" crecidos.

III. RESULTADOS Y DISCUSION

La morfología de los "films" de MCT observados con MO y MEB, reveló un aspecto homogéneo con excepción de algunas zonas de películas de MCT crecidas sobre CdTe (111)Te las que mostraron zonas en forma de islas. Estas áreas irregulares delineadas por ataque térmico mostraron un aspecto similar dentro y fuera de las islas en concordancia con las observaciones de otros investigadores quienes determinaron que se trataba de zonas crecidas con orientación de macla (las que actúan como defectos donores en el MCT con $x=0.2$ de tipo p)^{9,10}

Los diagramas de Laue demostraron la excelente calidad cristalina de los crecimientos .

La concentración superficial medida con microsonda resultó homogénea ($\Delta x=8\%$). Se encontró una variación promedio de la concentración entre 0.16 y 0.20. El espesor e de los "films" fue medido con un equipo medido en el laboratorio ($\Delta e=+1$ um) y con mayor precisión en los perfiles clavados empleando el MEB. El espesor medio de los "films" varió entre 47 y 82 um mostrando la siguiente correlación de los espesores con la orientación cristalográfica:

$$e(111)Te < e(110) < e(111)Cd < e(100)$$

A pesar de las pequeñas diferencias de espesores (1 a 20 um) y de la tendencia a considerarlas debidas a fluctuaciones de T y p_{Hg} es necesario señalar que la estructura superficial de los sustratos semiconductores está íntimamente relacionado con la química de la superficie la cual define las condiciones de crecimiento del "film" debido a las propiedades electrónicas y a la geometría atómica de las mismas¹¹. Las caras polares {111} y {100}

terminan con una o dos uniones sin saturar. Las caras no polares {110} terminan idealmente en átomos de Cd y Te con una única ligadura y se transforman por rehibridación de las ligaduras superficiales en estructuras ordenadas simétricas de tipo (1x1). Khan¹¹ sugiere que los plano (110) y (111) Te exhiben un desplazamiento atómico similar debido a la rehibridación. Este hecho explica probablemente los valores cercanos de espesor de película obtenidos para los planos (47 um y 48 um, respectivamente) para las mismas condiciones de crecimiento.

Los perfiles de las muestras clavadas fueron atacadas con solución Polisar 2 a temperatura ambiente durante 5 a 15 segundos. Las Figs. 1.a, 1.b, 1.c y 1.d son los perfiles sobre el clivaje de los depósitos de MCT de orientaciones (111)Te, (111)Cd, (100) y (110), respectivamente. Las zonas sobre atacadas corresponden al sustrato el CdTe. Las figuras de corrosión correspondientes a las islocaciones se distribuyen en la región del gradiente de composición (zona de interdifusión) sobre los perfiles. Sobre la superficie epitaxial la densidad de dislocaciones medida fue $d \sim 5.10^5$ cm⁻³ de acuerdo con la hallada en el sustrato y se revela un gradiente de dislocaciones de desajuste (misfit) que desaparece a un dado espesor del "film". Sólo las dislocaciones pasantes (threading) que vienen del sustrato subsisten en la superficie del "film". Los perfiles de composición se grafican en función del espesor del depósito, la fig.2 es $x(\text{At.}\%)$ en función de e (um) para un crecimiento (111)Te.

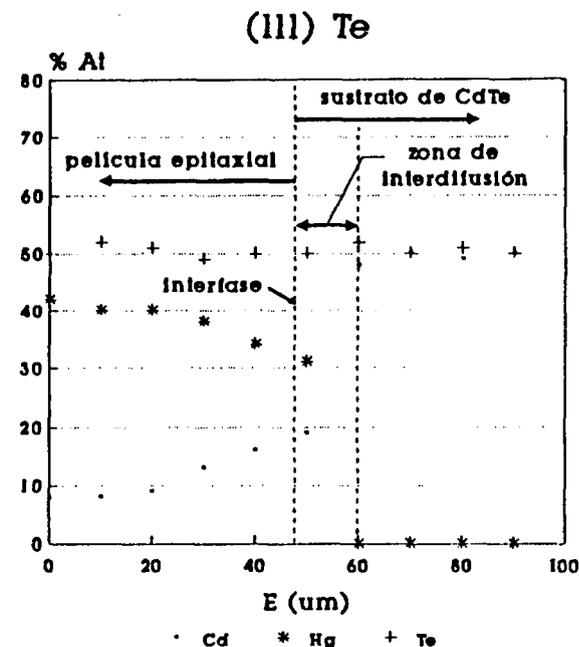


Fig 2: Perfiles de composición en función del espesor del depósito.

Figura 1a: (111)Te

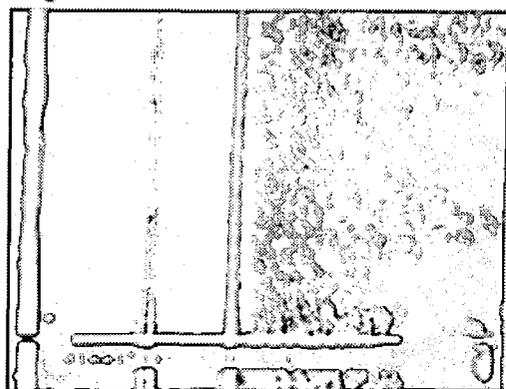
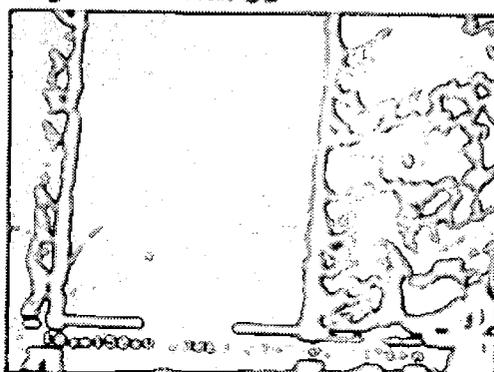


Figura 1b: (111)Cd

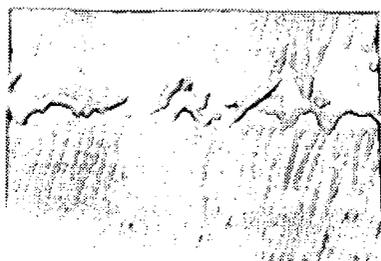


Epitaxia Sustrato (I)

Sustrato
sobrerevelado

Zona de
interdifusión

Interfase (I)



1µm



Figura 1c: (100)



Figura 1d: (110)

Fig 1: Perfiles sobre el clivaje de los depósitos de MCT

Los coeficientes de interdifusión D fueron evaluados por el clásico método de Matano y por el de Fleming y Stevenson [12] a partir de las curvas de variación de con posición. El $D = 1.6 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ coincide con el hallado en la literatura^{12,13}. A pesar de haberse postulado como probables para la difusión dos mecanismos: vacancias e intersticiales, en las condiciones de este trabajo (alta T , bajos p_{Hg} y x) el primero es el más probable¹³. En los depósitos (111)Te, (111)Cd y (110) aparecen agujeros de forma geométrica alineados sobre la interfase original, que no se observan en los depósitos (110). Estos se asociaron con efecto Kirkendall (EK) porque se observó movimiento de marcadores^{14,15} en el sistema CdTe/HgTE. Sin embargo, Tang y Stevenson¹³ mostraron que el movimiento de los marcadores no representa un EK real, ya que su velocidad depende del tipo y tamaño de los marcadores y que $D \cdot p_{\text{Hg}} \sim D \cdot p_{\text{Cd}} \ll D \cdot p_{\text{Te}}$. El movimiento de los

marcadores puede ser asignado entonces a una concentración de defectos puntuales (vacancias) fuera del equilibrio, los que pueden ser emitidos por las dislocaciones de desajuste cerca de la interfase. Es probable descartar el efecto de pulido o de óxidos superficiales.

Las mediciones eléctricas revelaron un material de tipo p con una densidad de portadores (cm^{-3}) de: $6 \cdot 10^{16} < p < 5 \cdot 10^{17}$, una movilidad de portadores ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) de: $190 < \mu < 766$ y una resistividad p ($\Omega \cdot \text{cm}$) de: $3 \cdot 10^{-2} < p < 1 \cdot 10^{-1}$, mostrando estas características que el material crecido resulto de excelente calidad.

REFERENCIAS

- 1- Bailly F., C. R. Acad. Sci. (Paris), 262, 635 (1966).

- 2- Svob L, Marfaing Y, Triboulet R., Bailly F. y Cohen-Solal G., J. Appl. Phys, 46 (10), 4251 (1975).
- 3- Tufte O. y Stelzer E. J. Appl. Phys, 10 (11), 4559 (1969).
- 4- Sivananthan S, Chu X, Reno J. y Faurie J. J. Appl. Phys, 60, 1359 (1986).
- 5- *II-VI and I-VII Compounds Semi magnetic Semiconductors*, Ed. Lan dolt-Borstein Springer Verlag, 17, 163 (1982).
- 6- Inowe M., Teramoto I. y Takayanagi S. J. Appl. Phys, 33, 2578 (1962).
- 7- Heredia E. Tesis de Lic. Fis. FACEN, UBA, (1989).
- 8- Becla P., Wolf P. Agarwall R. y Yuen S. J. Vac. Sci. and Technol. 43 (1), 119 (1985).
- 9- Heils J., Russell G., Brinkman A. y Woods J. J. Cryst. Growth, 79, 940 (1986).
- 10- Capper P., Maxey C., Whiffin P, y Easton B., J. Cryst. Growth, 96, 519 (1989).
- 11- Kahan A. Surface Sci, 168, 1 (1986).
- 12- Fleming J. y Stevenson D, Phys, Status Solidi, A, 105, 77 (1987).
- 13- Stevenson D, y Tang M., J. Vac. Sci and Technol. B. 9, (3), 1615 (1991).
- 14- Leute V. y Stratmann W., Physik Chem, 90, 172 (1974).
- 15- Tang M. y Stevenson D, Comunic, privada (1992).
- 16- Higgins W., Pultz G., Roy R., Lancaster R. y Schmit J., J. Vac. Sci. and Technol. A, 7 (2), 271 (1989).