

## Complex dielectric function of CdTe/GaAs thin films studied by spectroscopic ellipsometry

Gwangsoo Jeon, Jaehyuk Jo and Hyoyeol Park<sup>\*,†</sup>

Department of Physics, Busan National University, Busan 680-749, Korea

<sup>\*</sup>Department of Semiconductors Applications, Ulsan College, Ulsan 680-749, Korea

(Received May 24, 2005)

(Accepted June 10, 2005)

**Abstract** Spectroscopic ellipsometry measurements of the complex dielectric function of the CdTe thin films grown on GaAs(100) substrates by hot wall epitaxy have been performed in 1.5~5.5 eV photon energy range at room temperature. The spectroscopic ellipsometer spectra revealed distinct structures at energies of the  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$ , and  $E_2$  critical points. These energies were decreased with increasing thickness of CdTe thin films.

**Key words** CdTe thin film, Spectroscopic ellipsometry, Dielectric function

## 타원 분광기를 이용한 CdTe/GaAs 박막의 복소 유전함수에 관한 연구

진광수, 조재혁, 박효열<sup>\*,†</sup>

부산대학교 물리학과, 부산, 680-749

<sup>\*</sup>울산과학기술대학 반도체응용과, 울산, 680-749

(2005년 5월 24일 접수)

(2005년 6월 10일 심사완료)

**요약** Hot-wall epitaxy법으로 GaAs 기판 위에 성장시킨 CdTe 박막을 실온에서 포톤에너지 1.5~5.5 eV 영역에서 타원 분광기로 복소 유전함수를 구하였다. 타원분광기의 스펙트럼에서는  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$ ,  $E_2$ 의 임계점이 관찰되었으며 이들 에너지는 CdTe 박막의 두께가 증가함에 따라 감소하였다.

### 1. 서론

CdTe는 적외선 탐지 물질인 HgCdTe 성장시 완충층(buffer layer) 활용 및 광전소자 그리 감마선 검출기 등 CdTe의 기술적 중요성으로 인하여 II-VI 화합물 반도체 중 중요한 물질로 평가받고 있다[1-3]. 실온에서 CdTe와 GaAs는 격자상수는 각각 6.481과 5.653 Å으로[4] 두 물질 사이의 격자 부정합이 14.6%나 되기 때문에 양질의 HgCdTe 박막을 얻기 위해서는 GaAs 기판위에 완충층으로 CdTe를 성장할 필요가 있으며 HgCdTe층은 이 완충층(buffer layer)의 결정성에 따라 제한을 받게 된다. 따라서 GaAs 위에 CdTe 박막 성장시 특성 향상은 매우 중요하다.

특히 최근에는 군사용으로 많이 이용되는 적외선 검출기인 HgCdTe(MCT)의 기판으로 CdTe를 사용하는 연구가 활발하며 품질이 좋고 면적이 넓은 CdTe 기판을 얻기 위한 연구가 꾸준히 진행되고 있다[5-8]. 박막 성장법 중의 하나인 고온열벽 적층법(Hot Wall Epitaxy: HWE)에 의한 결정성장은 결정분자가 가지는 열에너지를 안정 시켜서 결정 성장이 이루어지므로, 물리적 흡착에 의한 것이라기보다 화학적 흡착에 의한 것으로 양질의 결정을 얻을 수 있는 잇점이 있으며, 이에 관한 연구가 많이 보고 되고 있다[9-11].

본 연구에서는 HWE법으로 GaAs(100) 기판 위에 CdTe 박막을 성장시켜 분광 타원해석법(spectroscopic ellipsometry: SE)으로 두께에 따른 박막의 반사광 세기 와 위상차  $\Delta$ 값을 두께에 따라 측정하여 복소 유전율과 복소 굴절률을 얻었으며, 유전율의 허수부로부터 광학적 전이 에너지  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$ ,  $E_2$ 를 구하여 압축 변형력에 관하여 논의하였다.

<sup>†</sup>Corresponding author

Tel: +82-52-279-3282

Fax: +82-52-279-3291

E-mail: hypark@mail.ulsu.ac.kr

### 2. 실험

분광 타원 해석기(spectroscopic ellipsometry: SE)에 사용된 CdTe 박막은 HWE를 이용하여 GaAs 기판위에 성장된 것을 이용하였다[14]. 분광타원 해석기는 회전 검광자(rotating analyzer ellipsometer, RAE)방식으로 광원-편광자-보정기-시료-검광자-광검출기로 구성된 PCSA (Polarizer, Compensator, Sample, Analyzer)계 분광 타원해석기(VASE, J.A Woollam, U.S.A)이다. Xenon lamp(70 W)로 부터 나온 광은 fiber optic cable을 통하여 고정된 편광자와 보정기를 통과하여 시료에 입사시키고 반사된 광은 회전 검광자를 통하여 광검출기로 빛의 세기를 측정한다. CdTe(111)/GaAs(100) 박막을 70° 입사각에 고정하고, 200~1000 nm의 에너지 영역에서 0.5 nm 간격으로 입사광의 파장을 변화시키면서 반사에 따른 진폭의 비  $\Psi$ 와 위상차  $\Delta$  값을 두께에 따라 측정하였다.

타원 분광해석기에서 측정되는 반사계수비  $\rho$ 를  $p$ 과  $s$ 파의 위상 변화  $r_p$ 와  $r_s$ , 위상차  $\Delta$  그리고 반사에 따른 진폭비  $\tan\Psi$ 로 표현하면

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \tan\Psi \exp(i\Delta) \tag{1}$$

로 주어진다. 또한 복소 유전함수는

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \sin^2\Theta_0 \left[ 1 + \left\{ \frac{(1-\rho)^2}{1+\rho} \right\} \tan\Theta_0 \right] \tag{2}$$

는 같다. 여기서  $\varepsilon_0$ 는 진공중에서 유전율이고  $\Theta_0$ 는 입사각이다. 식 (2)를 유전함수의 실수부( $\varepsilon_1$ )와 허수부( $\varepsilon_2$ )로 분리하면

$$\varepsilon_1 = \sin^2\Theta_0 \left[ 1 + \tan^2\Theta_0 \frac{(Q^2 - S^2)}{(1 + C)^2} \right] \tag{3}$$

$$\varepsilon_2 = \sin^2\Theta_0 \tan^2\Theta_0 \frac{2QS}{(1 + C)^2} \tag{4}$$

이다. 여기서  $Q = \cos 2\Psi$ ,  $S = \sin 2\Psi \sin \Delta$ ,  $C = \sin 2\Psi \cos \Delta$ 이다.

측정된 위상차  $\Delta$ 와 반사에 따른 진폭비  $\tan\Psi$ 를 식(3)과 (4)에 대입하여 유전함수의 실수부( $\varepsilon_1$ )와 허수부( $\varepsilon_2$ )를 구하였다.

### 3. 결과 및 논의

GaAs(100) 기판위에 성장된 CdTe 박막을 300 K에서 타원해석기로부터 측정한  $\Psi$ 와 위상차  $\Delta$ 값을 식(3)과

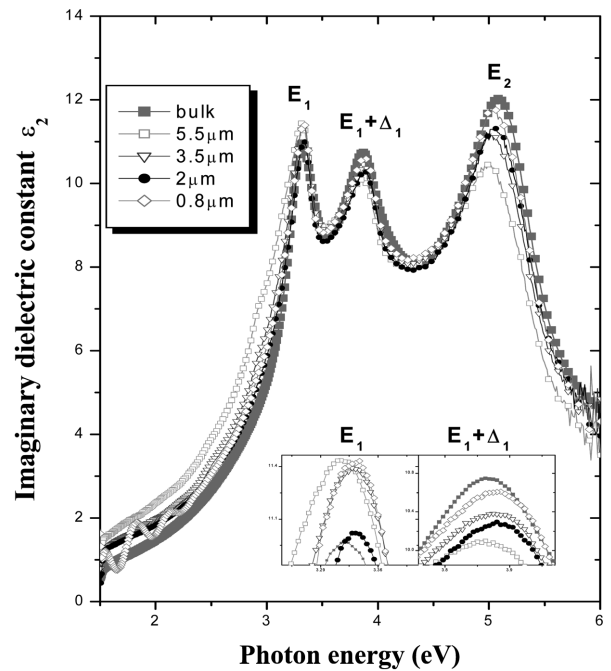


Fig. 1. Imaginary part ( $\varepsilon_2$ ) of dielectric function of CdTe/GaAs thin films.

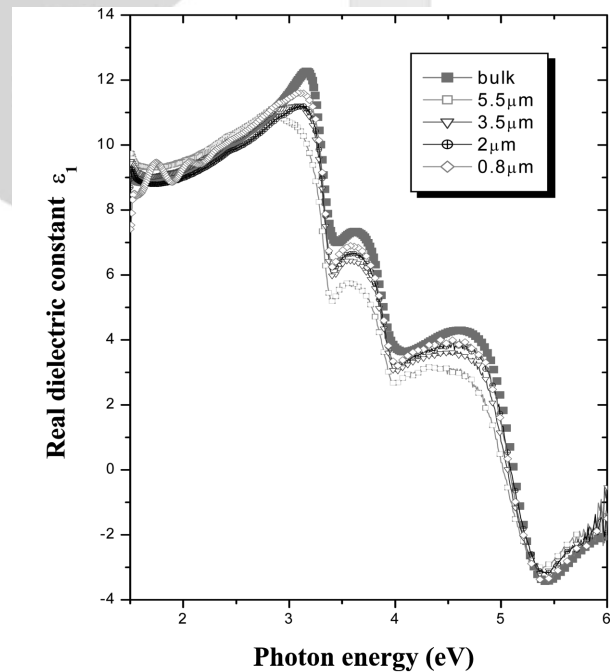


Fig. 2. Real part ( $\varepsilon_1$ ) of CdTe/GaAs thin films.

(4)에 대입하여 구한 유전함수의 허수부( $\varepsilon_2$ )와 실수부( $\varepsilon_1$ )를 Fig. 1과 2에 나타내었다. 포톤 에너지 3.3, 3.8 그리고 5.1 eV 근처에서 강한 전자 전이를 볼 수 있다. 이것은  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$  그리고  $E_2$  천이에 해당하는 피크들이며[12], 이것을 Fig. 3의 CdTe 띠구조[13]에 나타내었다. 이 그림의  $E_1$ 과  $E_1 + \Delta_1$ 은, Brillouin Zone에서 [111]

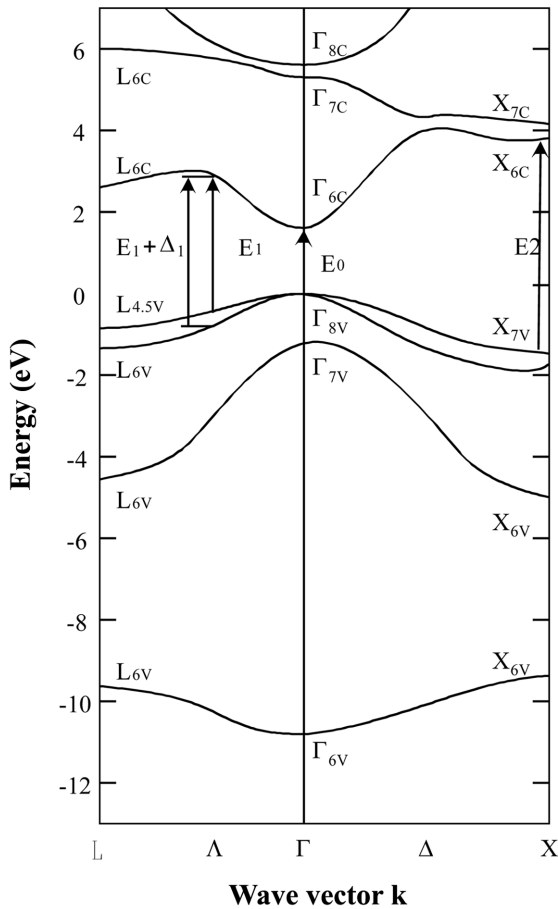


Fig. 3. CdTe energy band structure.

방향(혹은 L-점)의  $\Lambda$  대칭축에 위치한 가전자 띠 끝과 전도 띠 바닥 사이의 전이이다. 즉,  $E_1$ 은  $\Lambda_{4,5v}$  가전자 띠에서  $\Lambda_{6c}$  전도 띠로,  $E_1 + \Delta_1$ 은  $\Lambda_{6c}$  가전자 띠에서  $\Lambda_{6c}$  전도 띠로 전이 한 것이다. 그리고  $E_2$ 는 Brillouin Zone의 [100] 방향인 X-점에서 일어나는 전이로  $X_{7v}$  가전자 띠에서  $X_{6v}$  전도 띠로 전자 전이에 의한 것이다.  $\Delta_1$ 은  $\Lambda_{4,5v}$ 와  $\Lambda_{6c}$  사이의 에너지 차로써 스핀 궤도 분리이다.

Fig. 1에서 전이 에너지는 두께가 감소할수록 CdTe bulk의 것보다 고 에너지 쪽으로 이동하는 것을 볼 수 있다. 그리고 두께가 5.5  $\mu\text{m}$ 에서는 피크 세기가 조금 약해졌지만 피크 위치는 CdTe bulk와 거의 같아짐을 알 수 있었다. Park[14] 등의 X-선 회절실험과 거의 일치하며 두께 5.5  $\mu\text{m}$  이상에서는 거의 biaxial 압축 변형력이 완화되는 모습을 알 수 있다. 두께 0.8  $\mu\text{m}$ 에서는 1.5~2.5 eV에서 여러 개 피크가 나옴을 볼 수 있고, 이것은 CdTe 두께가 매우 얇아서 GaAs 기판과 CdTe 사이 계면으로부터 생기는 것이라고 생각되어진다.

이 그림으로부터 두께에 변화에 따른  $E_1 + \Delta_1$ ,  $E_1$ ,  $\Delta_1$  값을 Fig. 4와 Table 1에 나타내었다. 두께에 따라 전자의 전이 에너지가 감소하는 것은 biaxial 압축 변형력에

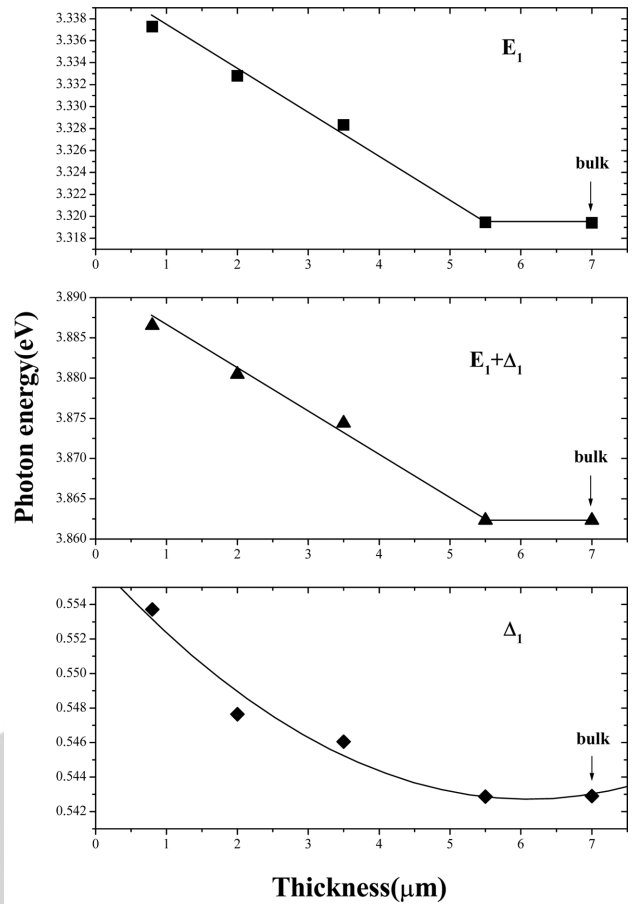


Fig. 4. Transition energies of CdTe/GaAs thin films at different thickness obtained by imaginary part of dielectric function.

Table 1  
Transition energies ( $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$ ) of CdTe/GaAs thin films at different thickness obtained by imaginary part of dielectric function

Thickness of CdTe thin films ( $\mu\text{m}$ )	$E_1$ (eV)	$E_1 + \Delta_1$ (eV)
Bulk	3.31941	3.86231
5.5	3.31945	3.86231
3.5	3.32832	3.87437
2	3.3328	3.88044
0.8	3.33728	3.88652

따른 에너지 밴드구조의 변화 때문이다[15, 16]. 그리고  $\Delta_1$ 은 두께가 두꺼워질수록 에너지 차이가 감소함을 알 수 있다. 이것은 고온에서 박막이 기판 위에 성장되어 낮은 측정 온도로 내려오는 동안 기판의 두께가 박막에 비하여 월등히 크기 때문에 기판과 같은 수축률로 수축된다. 그런데 자신의 수축률로 수축하지 못한 박막은 이미 고체상태 이므로 박막 원자들은 자유로이 움직이지 못하고 자신과 기판과의 수축률 차이를 탄성 에너지로 보유할 수밖에 없게 된다. 그 탄성 에너지를 박막이 나누어 갖는 방법은 기판과 계면에서 멀리 떨어진 면일수

록 단위 길이당 보유 에너지를 적게 가진다. 이는 두 판 사이에 수많은 용수철이 끼어 있다고 하였을 경우, 한쪽을 눌렀을 때 누른 점에서 떨어진 곳일수록 적게 수축이 되고, 용수철이 가지는 탄성 에너지는 수축한 거리의 제곱에 비례하는 것과 같은 현상으로 설명할 수 있다. 한편 복소 굴절률은

$$N = (\epsilon)^{1/2} = n + ik \quad (5)$$

로 주어지고 실수부와 허수부를 분리하면

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (6)$$

$$\epsilon_2 = nk \quad (7)$$

로 주어진다.

복소 유전율은, 유전율의 실수부( $\epsilon_1$ )와 허수부( $\epsilon_2$ )를 이용하여 구한 굴절율( $n$ )과 소광계수( $k$ )를 각각 식 (8)와 (9)에 나타내었다.

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2} + \epsilon_1(\omega)}{2}} \quad (8)$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2} - \epsilon_1(\omega)}{2}} \quad (9)$$

식(8)과 (9)를 이용하여 구한 굴절률과 소광계수를 Fig. 5와 6에 나타내었다. 이 그림에서 두께가 5.5  $\mu\text{m}$ 인 CdTe 박막인 경우 He-Ne 레이저의 파장인 6328  $\text{\AA}$ (1.96 eV)에 대응하는 복소굴절률 값은  $N = 3.096 + i 0.367$ 이

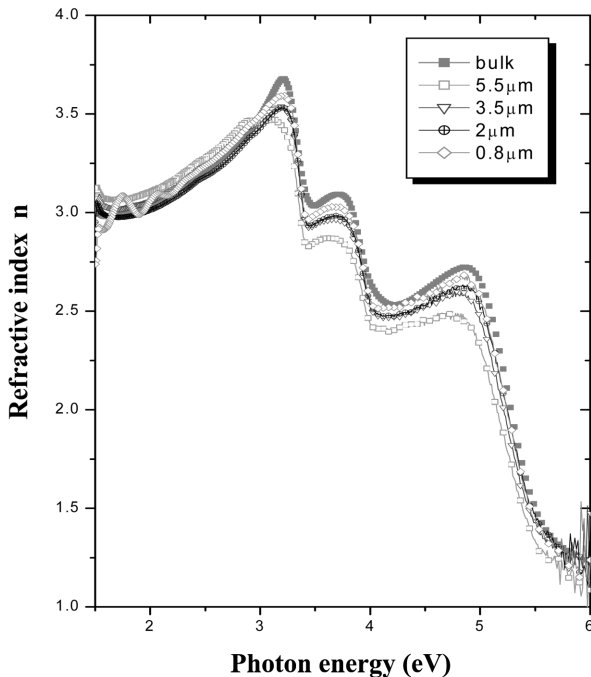


Fig. 5. Refractive index of CdTe/GaAs thin films.

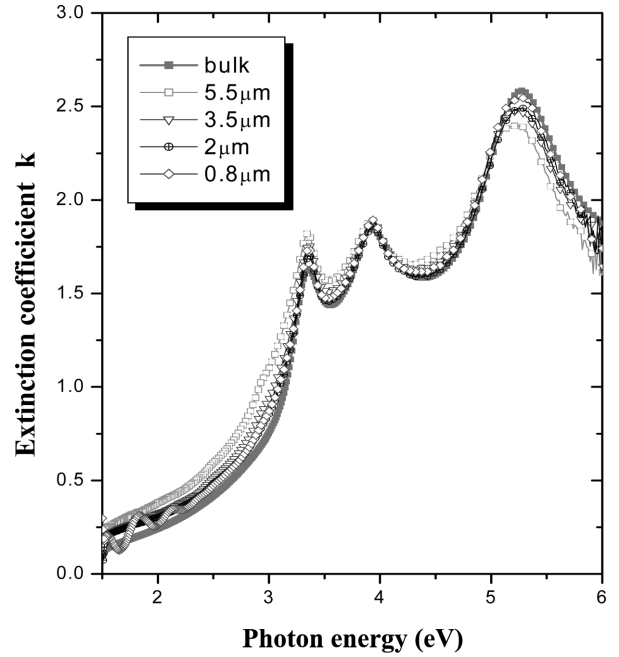


Fig. 6. Extinction coefficient of CdTe/GaAs thin films.

있고, Ar 레이저의 파장인 5145  $\text{\AA}$ (2.41 eV)에 대응하는 값은  $N = 3.376 + i 0.749$ 이었다. 소광계수  $k$ 는 결정내의 원자들에 의한 흡수 때문에 생기는 결과이며[17], 포톤 에너지가 증가함에 따라 급격하게 증가함을 볼 수 있다.

#### 4. 결 론

GaAs(100) 기판위에 HWE법으로 성장된 CdTe 박막을 SE 측정으로 다음과 같은 결론을 얻었다. 분광 타원 해석법으로부터 두께의 변화에 따른 CdTe 박막의 복소 유전율, 굴절율 및 소광계수를 구하였으며, 허수부 유전율로부터 전이 에너지,  $E_1$ 는  $E_1 + \Delta_1$  두께가 감소할수록 CdTe bulk의 것보다 높은 에너지 쪽으로 이동하였고 두께가 5.5  $\mu\text{m}$ 에서는 피크세기가 조금 약해졌지만 피크 위치는 CdTe bulk와 거의 같아짐을 알 수 있다. 그리고 고온에서 박막이 기판 위에 성장되어 낮은 온도로 내려오는 동안 기판의 두께가 박막에 비하여 월등히 크기 때문에 기판과 같은 수축률로 수축되기 때문에  $\Delta_1$ 은 두께가 두꺼워질수록 에너지가 감소하고 있음을 알 수 있었다.

또한, 두께가 5.5  $\mu\text{m}$ 인 CdTe 박막인 경우 He-Ne 레이저의 파장인 6328  $\text{\AA}$ (1.96 eV)에 대응하는 복소굴절률 값은  $N = 3.096 + i 0.367$ 이었고, Ar 레이저의 파장인 5145  $\text{\AA}$ (2.41 eV)에 대응하는 값은  $N = 3.376 + i 0.749$ 이었다.

## 참 고 문 헌

- [ 1 ] M. Jain, "II-VI Semiconductor compounds" (World Scientific, Singapore, 1993) p258.
- [ 2 ] K. Zanio, "Semiconductor and semimetals", Vol. 13 (Academic, New York, 1980).
- [ 3 ] Y.-R. Ge and H. Wiedemeier, "Transient behavior of  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  film growth on (111)B CdTe substrates by chemical vapor transport", J. Electronic Mater. 28 (1999) 91.
- [ 4 ] H. Tatsuoka, H. Kuwabara, Y. Nakanishi and H. Fujiyasu, "Strain relaxation of CdTe(100) layers grown by hot-wall epitaxy on GaAs(100) substrates", J. Appl. Phys. 67 (1990) 6860.
- [ 5 ] M. Fiederle, V. Babentsov, J. Fauler and J.P. Konrath, "Growth of high resistivity CdTe and (Cd, Zn) Te crystals", Cryst. Res. Technol. 38 (2003) 588.
- [ 6 ] M.S. Han, T.W. Kang, M.D. Kim, Y.T. Jeoung, H.K. Kim, J.M. Kim, H.J. Woo and T.W. Kim, "The effect of hydrogenation in  $Hg_xCd_{1-x}Te$  thin films grown on p-CdTe (211) B substrates", Appl. Sur. Sci. 120 (1997) 287.
- [ 7 ] Y.-R. Ge and H. Wiedemeier, "Transient behavior of  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  film growth on  $3^\circ$  off-(100) CdTe substrates by chemical vapor transport", J. Electronic Mater. 27 (1998) 891.
- [ 8 ] J.M. Ballingall, M.L. Wroge and D.J. Leopold, "(100) and (111) oriented CdTe grown on (100) oriented GaAs by molecular beam epitaxy", Appl. Phys. Lett. 48 (1986) 1273.
- [ 9 ] H. Tatsuoka, H. Kuwabara, H. Fujiyasu and Y. Nakanishi, "Growth of CdTe on GaAs by hot-wall epitaxy and its stress relaxation", J. Appl. Phys. 65 (1989) 2073.
- [10] C.Y. Bang, M.S. Lee, T.J. Kim and Y.D. Kim, "Above bandgap optical properties of ZnS and  $Zn_{1-x}Te_x$  alloys grown by hot wall epitaxy", J. Kor. Physical. Society 39 (2001) 462.
- [11] A. Lopez-Otero "Hot wall epitaxy", Thin Solid Films 49 (1978) 3.
- [12] L. Vina, C. Umbach, M. Cardona and L. Vodopyanov "Ellipsometric studies of electronic interband transitions in  $Cd_xHg_{1-x}Te$ ", Phys. Rev. B 29 (1984) 6752.
- [13] K.W. Böer, "Survey of semiconductor physics" (Van nostrand Reinhold, New York, 1990) p.233.
- [14] H.Y. Park, J.H. Jo, G.S. Jeon and Y.H. Hwang, "Hot - wall epitaxial growth and characteristic of CdTe films", J. Korean Cryst. growth and Cryst. Tech. 14 (2004) 140.
- [15] M.S. Han, T.W. Kang, J.H. Leem, B.K. Song, Y.B. Hou, W.H. Baek, M.H. Lee, J.H. Bahng, K.J. Kim, J.M. Kim, H.K. Kim and T.W. Kim, "Strain effects in CdTe(111) epitaxial layers grown on GaAs(100) substrates by molecular beam epitaxy", J. Electronic Mater. 26 (1997) 507.
- [16] K.J. Kim, M.H. Lee, T.W. Kang and M.S. Han, "Spectroscopic ellipsometry study on strain relaxation of CdTe/GaAs(001) epitaxial films", Solid State Commun. 106 (1998) 597.
- [17] M. Oikkonen "Ellipsometric studies on zinc sulfide thin films grown by atomic layer epitaxy", J. Appl. Phys. 62 (1987) 1385.