

Eigenschaften und elektronische Struktur von $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ mit $0.07 < x < 0.4$

Matthias Kreier

Humboldt Universität zu Berlin
Arbeitsgruppe Elektronische Eigenschaften und Supraleitung

20. 3. 2008



Überblick

- 1 Motivation
- 2 Eigenschaften von CdHgTe, Charakterisierung der Proben
 - Grundlegende Eigenschaften
 - Untersuchung der Zusammensetzung und Qualität
- 3 Präparation der (110)-Oberfläche
 - Allgemeines zum Aufbau
 - Überprüfung der Oberflächenqualität
- 4 Ergebnisse der Photoemission
 - Details und Besonderheiten der winkelaufgelösten Photoemission
 - Kernniveaus von CdHgTe
 - Die Valenzbandstruktur
- 5 Zusammenfassung



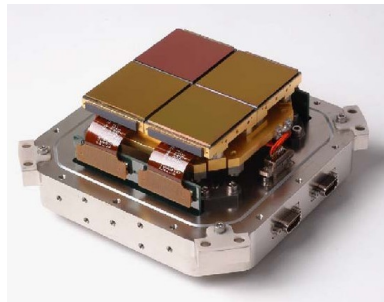
Wofür wird CdHgTe verwendet?

Infrarotdetektor

Seit den 40er Jahren war man auf der Suche nach einem Halbleiter für den langwelligen Infrarotbereich (LWIR, 8-14 μm). Lawson et. al. synthetisierten CdHgTe im Jahre 1958. Die Bedeutung ihrer Arbeit wurde schon früh erkannt, doch aufgrund des militärischen Hintergrundes bis in die späten 60er Jahre wenig veröffentlicht.

Infrarot-Astronomie

CdHgTe-Detektoren finden sich u. a. in den Experimenten NICMOS (Hubble 1997), Very Large Telescope der ESO in Chile (SINFONI 2005) oder WISE (NASA 2009).



Rockwell 2x2 2Kx2K
IR-Array Hawaii-2RG

Für 6,5m James Webb Space Telescope

Bisherige Untersuchungen an CdTe und HgTe

Dr. C. Janowitz: CdTe

C. Janowitz, L. Kipp, R. Manzke:

Experimental surface band structure of CdTe(110)

Surface Science 231 (1990) 25-31.

Dr. N. Orlowski: HgTe

N. Orlowski:

*Untersuchung der elektronischen Struktur von HgSe und HgTe
mittels winkelaufgelöster Photoemission*

Diplomarbeit, AG EES, (2000).



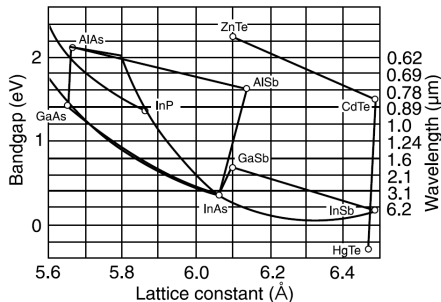
Das Material

- 1 Motivation
- 2 Eigenschaften von CdHgTe, Charakterisierung der Proben
 - Grundlegende Eigenschaften
 - Untersuchung der Zusammensetzung und Qualität
- 3 Präparation der (110)-Oberfläche
 - Allgemeines zum Aufbau
 - Überprüfung der Oberflächenqualität
- 4 Ergebnisse der Photoemission
 - Details und Besonderheiten der winkelaufgelösten Photoemission
 - Kernniveaus von CdHgTe
 - Die Valenzbandstruktur
- 5 Zusammenfassung

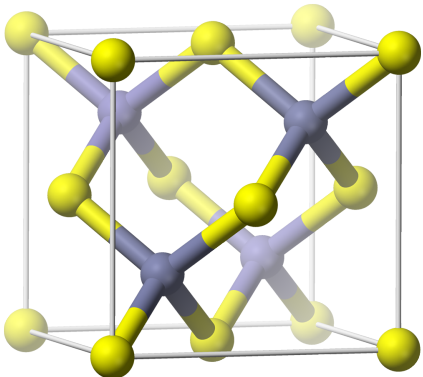


Eigenschaften von CdHgTe: ideal für IR-Detektoren

- Einstellbare Bandlücke von 0,7 bis 25 μm
- Direkte Bandlücke
- Hoher Absorptionskoeffizient
- Moderate Dielektrizitätskonstante und Brechungsindex
- Geringer thermischer Ausdehnungskoeffizient
- Passende Substrate für epitaktisches Wachstum über einen großen Wellenlängenbereich ($\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$)



Gitterstruktur und -parameter

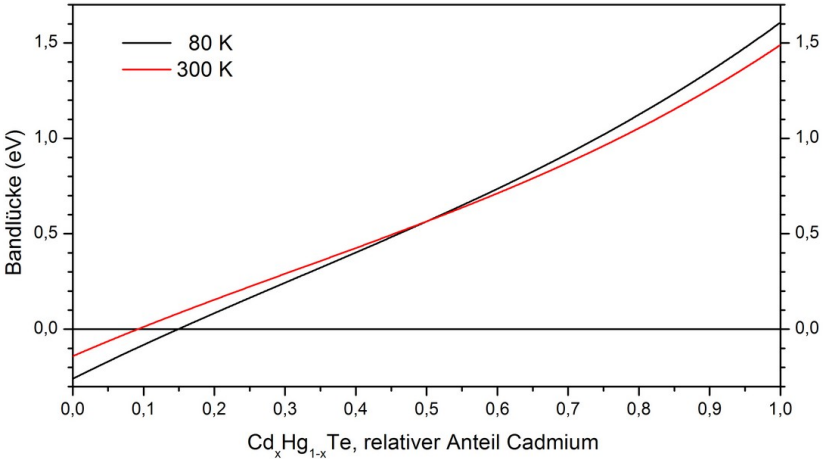


Gitterkonstanten

Substanz	$a/\text{\AA}$
HgTe	6,445
$\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$	6,464
CdTe	6,488

CdTe, HgTe sowie die ternäre Mischung CdHgTe kristallisieren in Zinkblende-Struktur.

Abhängigkeit der fundamentalen Lücke von Komposition



$$E_G = -0.302 + 1.93x - 0.81x^2 + 0.832x^3 + 5.35(1 - 2x)10^{-4} T$$



Übersicht der untersuchten Proben

$Cd_xHg_{1-x}Te$	I	II	III	IV	V	VI
Wert für x	0.07	0.4	0.2	0.183	0.1955	0.1045
Gewicht (mg)	186.3	130.3	158.5	129.2	248.5	108.9
Orientierung	[111]		[110]	[110]	[110]	[110]



Untersuchung mittels energiedissipativer Röntgenstrahlung

Probe	Referenz	Anteil Cd	Anteil Hg	Anteil Te	#
I	0.07	$0,063 \pm 0,003$	$1,031 \pm 0,007$	$0,907 \pm 0,005$	15
II	0.4	$0,390 \pm 0,005$	$0,650 \pm 0,005$	$0,957 \pm 0,007$	6
III	0.2				0
IV	0.183	$0,163 \pm 0,015$	$0,92 \pm 0,01$	$0,920 \pm 0,005$	3
V	0.1955	$0,160 \pm 0,006$	$0,92 \pm 0,01$	$0,920 \pm 0,005$	12
VI	0.1045	$0,110 \pm 0,007$	$0,978 \pm 0,009$	$0,910 \pm 0,006$	9

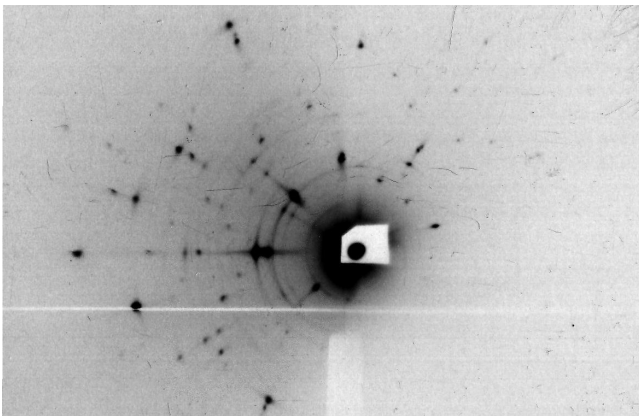
- Anzahl der Messungen EDX (Energy Dispersive X-ray spectroscopy)

Abweichungen

EDX ist eine standardfreie Messmethode. Der angegebene Fehler betrifft die Streuung unterschiedlicher Messungen, aus der Methode selbst ergibt sich ca. 10% Abweichung. Ursachen sind u.a. struktureller Natur.



Laue Transmissions-Aufnahme: kein Einkristall

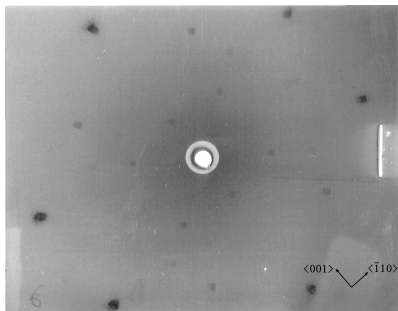


Polykristalline Anteile im Beugungsbild

Korngrößen beim Blockwachstum: 50 - 500 μm

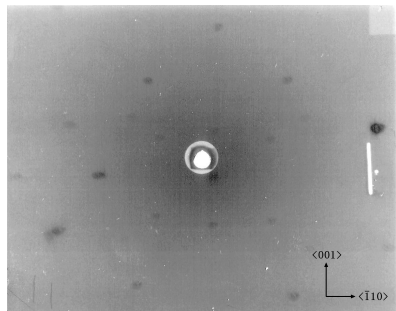
Orientierung mittels Laue-Reflektionsaufnahmen

Probe I ($x=0,4$)



Orientierung [110]

Probe V ($x=0,1855$)



Orientierung [110], 4° verkippt

Aufnahmeabstand 40 mm, 32 kV, 30 mA, 10 min



Die Vorbereitung

- 1 Motivation
- 2 Eigenschaften von CdHgTe, Charakterisierung der Proben
 - Grundlegende Eigenschaften
 - Untersuchung der Zusammensetzung und Qualität
- 3 **Präparation der (110)-Oberfläche**
 - Allgemeines zum Aufbau
 - Überprüfung der Oberflächenqualität
- 4 Ergebnisse der Photoemission
 - Details und Besonderheiten der winkelaufgelösten Photoemission
 - Kernniveaus von CdHgTe
 - Die Valenzbandstruktur
- 5 Zusammenfassung



Vorbereitung der Probe zur Messung

Anforderungen der Photoelektronenspektroskopie

- Methode sehr oberflächensensitiv (wenige Å)
- Messungen erfordern Ultrahochvakuum ($p < 10^{-7}$ mbar)
- Oberflächen frei von Adsorbaten und Verunreinigungen

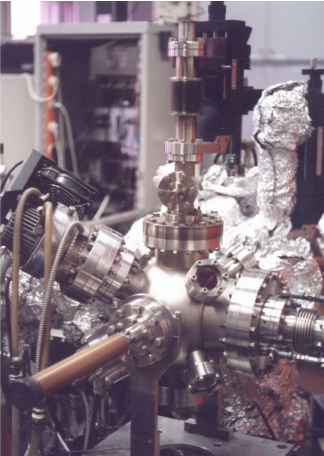
Präparation der Proben

- Sputtern und Annealen bei CdHgTe nicht möglich
- Kraft zum Spalten groß aufgrund kovalenter Bindungen
- Natürliche Spaltfläche der II/VI-Halbleiter ist (110)
- (110)-Oberfläche ist unipolar



Präparation der Oberfläche - Aufbau einer Spaltkammer

Spaltmechanismus, Norbert Orlowski, Doktorarbeit 2000



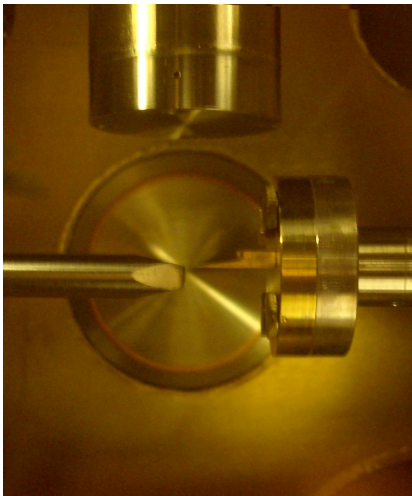
Norbert Orlowski 2000



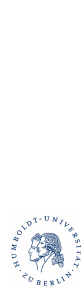
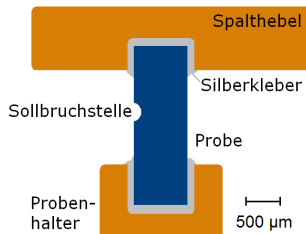
Matthias Kreier 2006



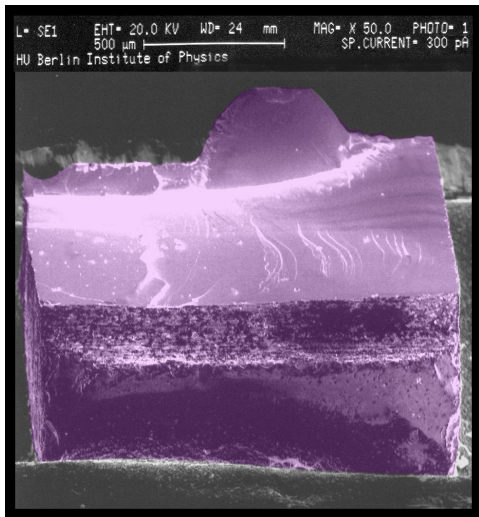
Spalten der Proben im Probenhalter



Spaltkammer von innen



Kontrolle der Oberfläche mit Rasterelektronenmikroskop



Ergebnisse des SEM/REM

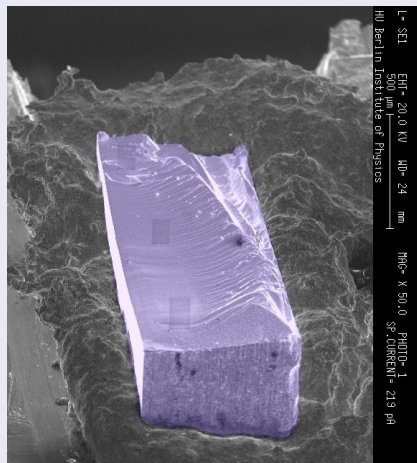
Deutlich ist die Sollbruchstelle in Form eines Grabens von 100 μ m Tiefe im Vordergrund erkennbar. Ebenso wird eine gestufte Struktur der (110)-Oberfläche sichtbar.

LEED nicht erfolgreich

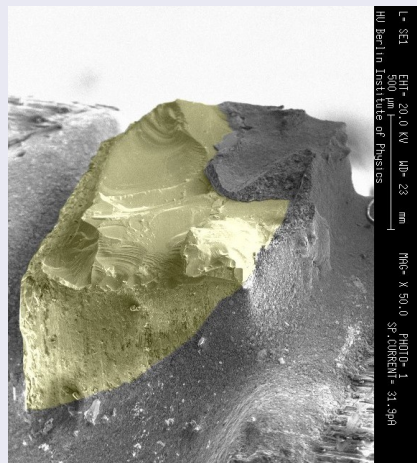
Ein Beugungsbild konnte erst nach einer gekühlten Spaltung bei 100 K erzeugt werden.

Ergebnisse der Spaltungen

Erfolgreiche Spaltung



Misslungene Spaltung



Kontrolle der Oberflächenqualität mittels LEED

Beugung langsamer Elektronen

Beugungsbild zeigt:

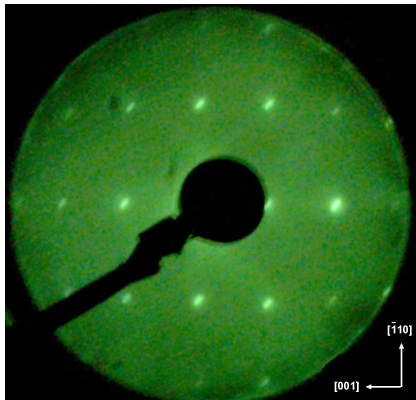
- kristalline Struktur
- keine Überstruktur

Relation Oberflächenperiodizität:

$$b_1 = \frac{1}{2}a \quad b_2 = \frac{1}{\sqrt{8}}a$$

Ergebnis aus LEED-Geometrie und
156 eV Anregungsenergie:

$$b_1 = (3,5 \pm 0,2)\text{Å} \quad b_2 = (2,4 \pm 0,2)\text{Å}$$

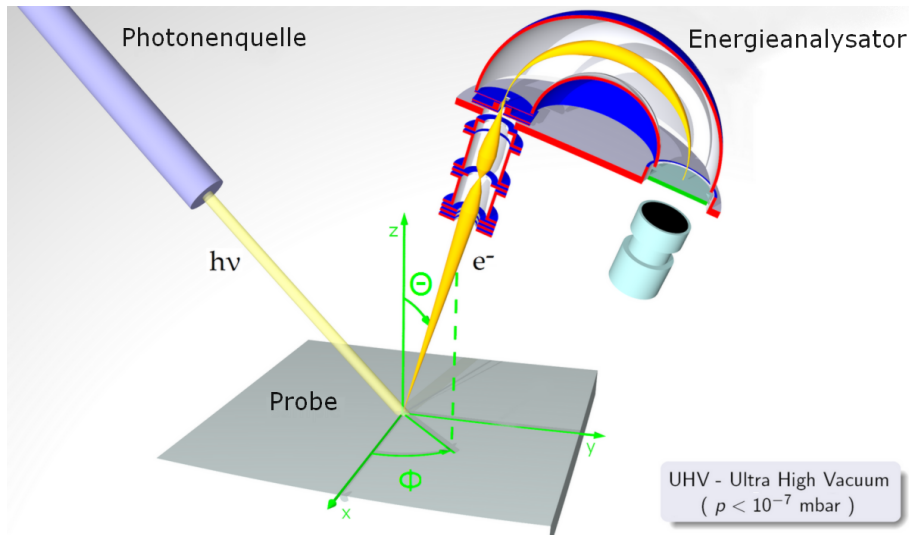


Die Photoelektronenspektroskopie

- 1 Motivation
- 2 Eigenschaften von CdHgTe, Charakterisierung der Proben
 - Grundlegende Eigenschaften
 - Untersuchung der Zusammensetzung und Qualität
- 3 Präparation der (110)-Oberfläche
 - Allgemeines zum Aufbau
 - Überprüfung der Oberflächenqualität
- 4 Ergebnisse der Photoemission
 - Details und Besonderheiten der winkelaufgelösten Photoemission
 - Kernniveaus von CdHgTe
 - Die Valenzbandstruktur
- 5 Zusammenfassung

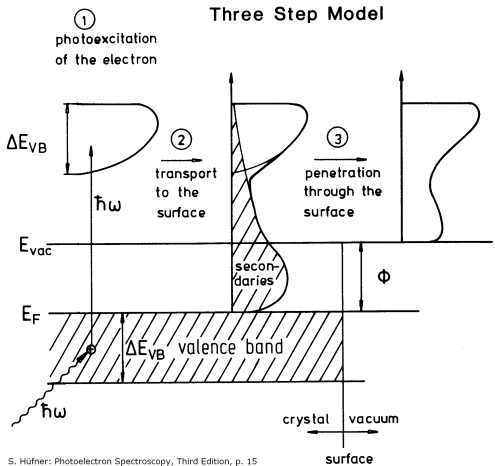


Allgemeiner Aufbau



Details und Besonderheiten der winkelaufgelösten Photoemission

Das Drei-Stufen-Modell der Photoemission



S. Hüfner: Photoelectron Spectroscopy, Third Edition, p. 15

1. Anregung des Elektrons

$$E_f = E_i + \hbar\omega \quad \vec{k}_f = \vec{k}_i$$

2. Transport zur Oberfläche

- Sekundärelektronen
- mittlere freie Weglänge

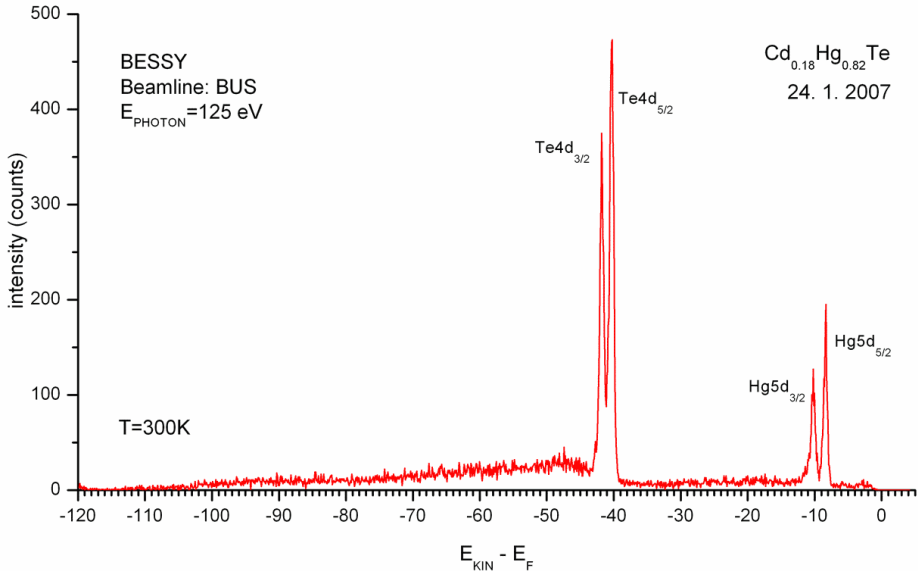
3. Oberflächendurchtritt

$$\vec{k}_{i||} = \vec{k}_{f||} = \vec{K}_{||} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} E_{kin} \sin \vartheta$$

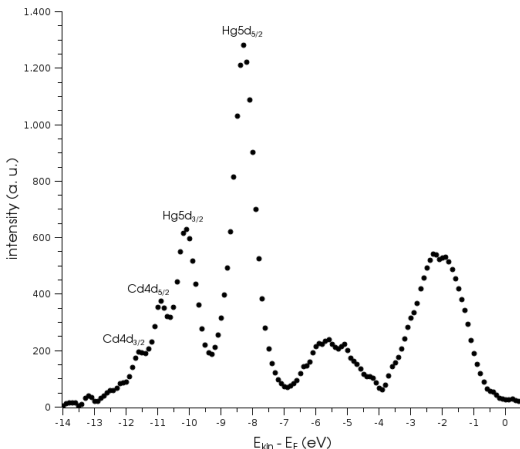
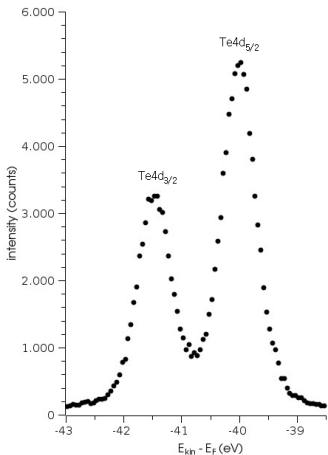
$$k_{f\perp} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_{kin} + |V_0|) - \vec{G}_{||}^2 - G_{\perp}}$$

Kernniveaus von CdHgTe

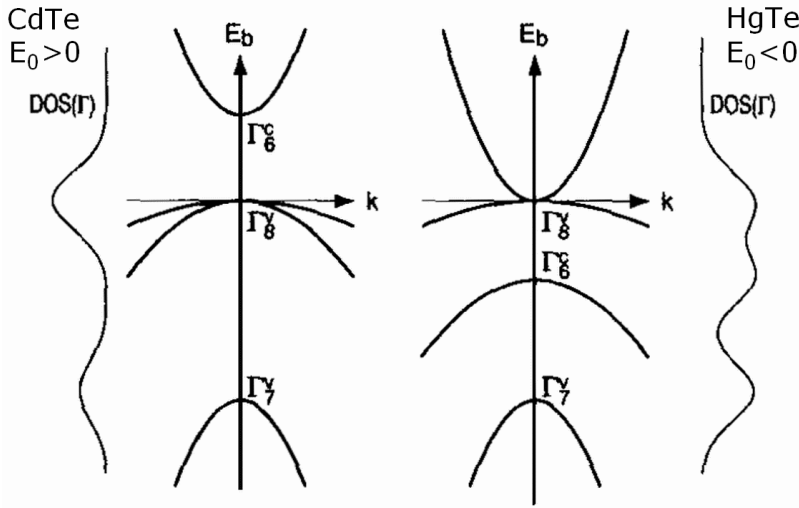
Übersichtsspektrum bei BESSY am BUS, $\hbar\omega = 125$ eV



Kernniveaus von Te, Cd und Hg

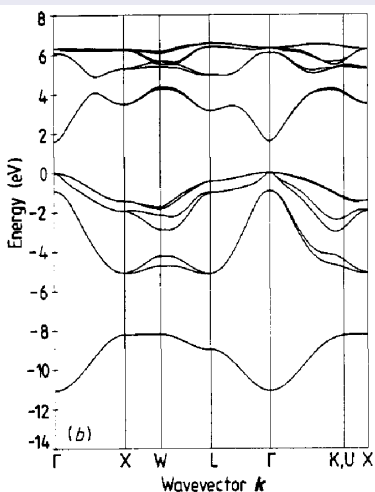


Negative Bandlücke: $E_G = E(\Gamma_6) - E(\Gamma_8)$

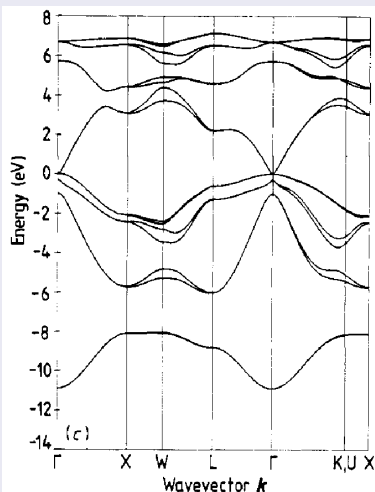


Theoretisch berechnete Bandstruktur

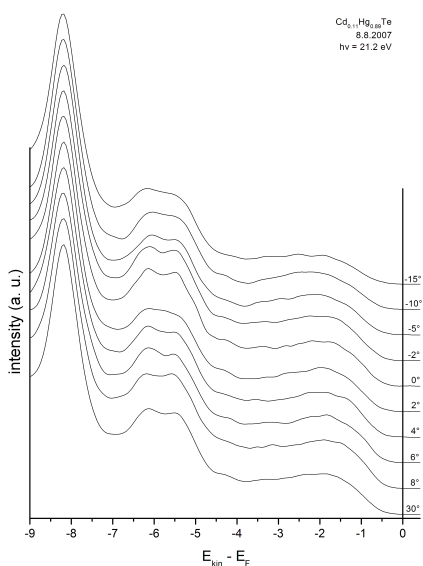
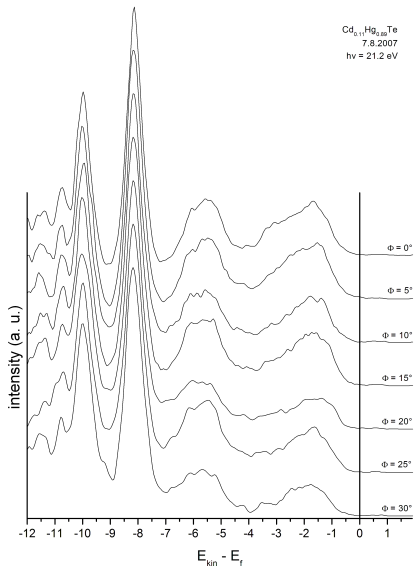
CdTe



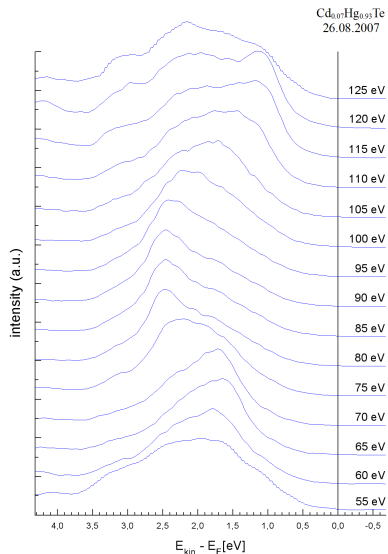
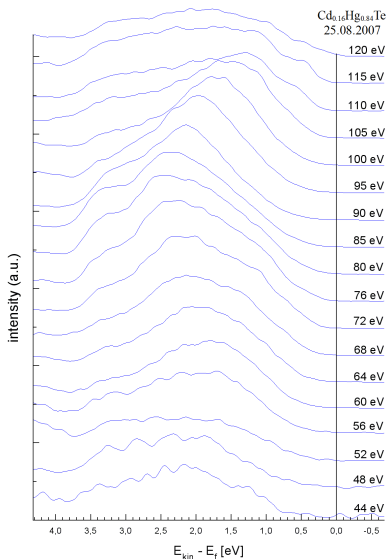
HgTe



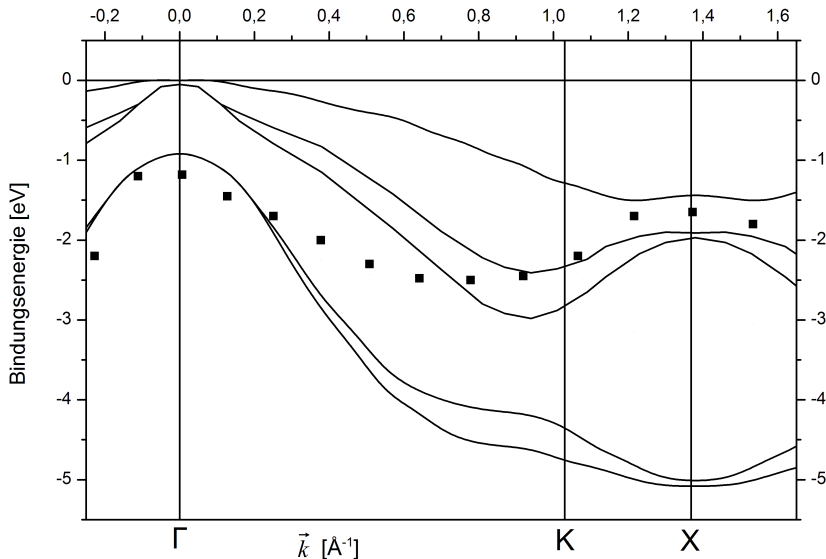
Ergebnis der winkelaufgelösten Messung



Messung in normaler Emission: $x=0.16$ und $x=0.07$



Dispersion des Maximums und Bandstrukturrechnung



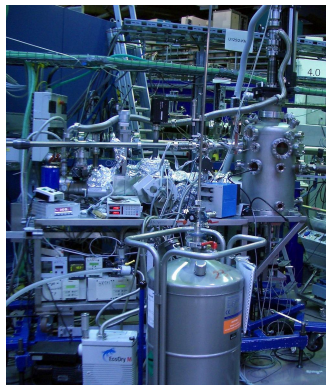
Vorbereiten der Messungen

Charakterisierung der Proben

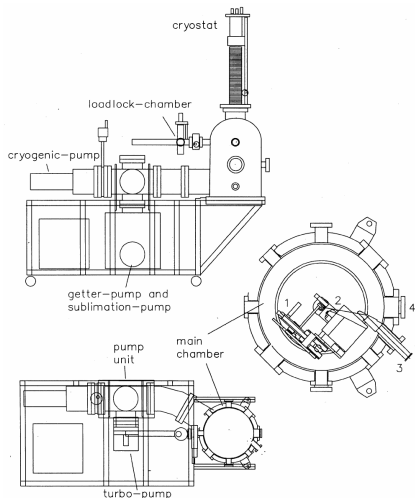
- Zusammensetzung mittels EDX verifiziert
- Proben sind polykristallin (Laue Transmission)
- Orientierung der Seitenflächen ist [110]

Präparation der (110)-Oberfläche

- Methode: Spalten, im Probenhalter möglich
- Sollbruchstelle verbessert Spalterfolg
- Gekühlte Spaltung notwendig (LEED)
- Nach Photoemissionsmessung muss Oberflächenqualität nochmals überprüft werden



Elektronische Eigenschaften von CdHgTe



Ergebnisse der Photoelektronenspektroskopie

- Winkelaufgelöste Messungen erfordern gute Oberflächen
- Feinere Winkelraasterung nötig (z. B. Scienta an BEST)
- Offene Frage:
Zustandsdichte an Fermi-Kante
- Dispersion in k_{\perp} gut sichtbar, eindeutig der Volumen-Brillouin-Zone zuzuordnen

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit



Automatische Stickstoff-Nachfüllanlage



Technik der Nachfüllanlage

Widerstand der Gesamtschaltung aus PT1000, R_1 und R_2

$$\frac{1}{R_{parallel}} = \frac{1}{R_1 + R_2} + \frac{1}{R_{PT1000}}$$

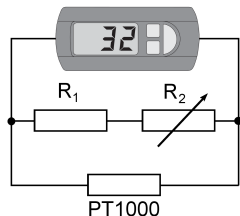
Temperaturabhängiger Widerstandswert eines PT100 nach IEC 751 / DIN EN 60751

$$R(T) = R_0(1 + aT + bT^2 + c(T - 100^\circ\text{C})T^3)$$

$$a = 3,9083 \cdot 10^{-3}\text{C}^{-1}$$

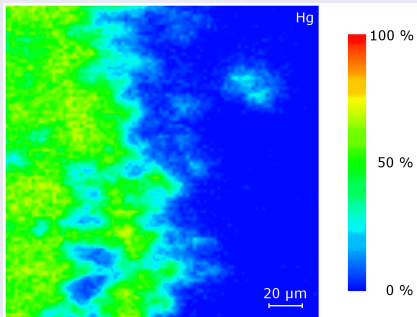
$$b = -5,755 \cdot 10^{-7}\text{C}^{-2}$$

$$c = -4,183 \cdot 10^{-12}\text{C}^{-4}$$

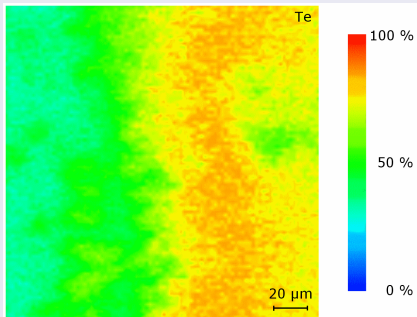


Sputtern und Annealen

Konzentration Quecksilber



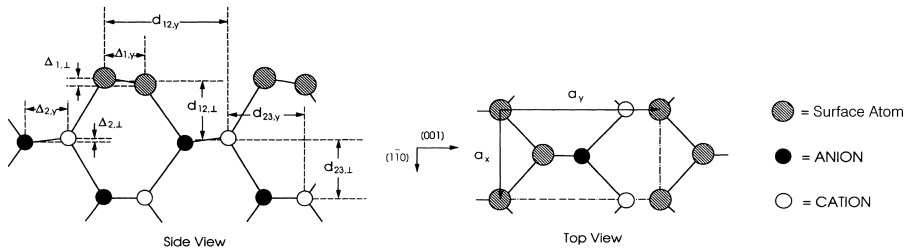
Konzentration Tellur



Ein Bereich der Proben wurde nach dem Erwärmen gesputtert. Dieser Bereich ist auf den beiden obigen Bildern in der jeweils linken Hälfte zu erkennen. Dort besteht wieder das ursprüngliche Verhältnis zwischen Hg und Te.



Oberflächen-Relaxation von (110)-ZnS-Kristallen

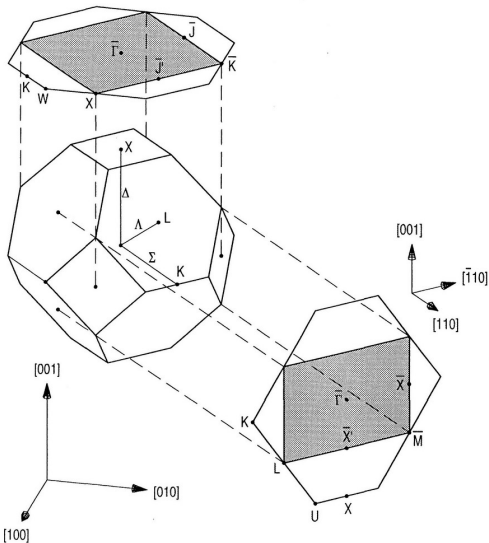


Weitere Informationen:

<http://people.physik.hu-berlin.de/~kreier/>



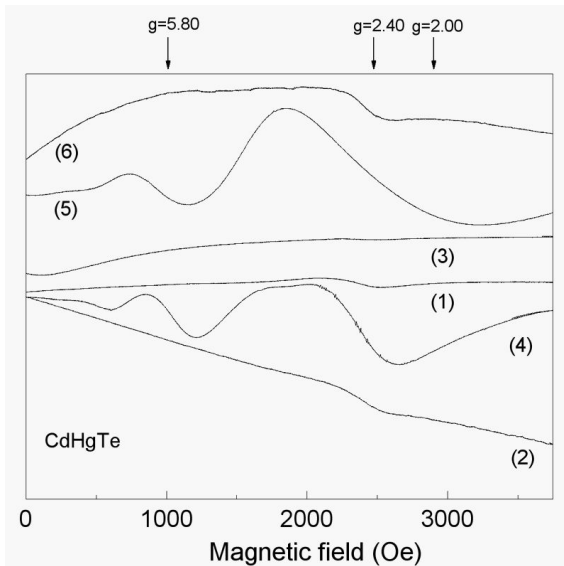
Brillouin-Zone von ZnS-Kristallen



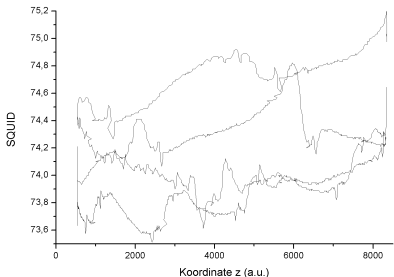
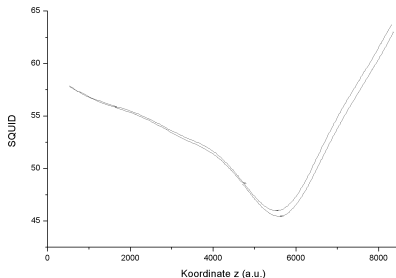
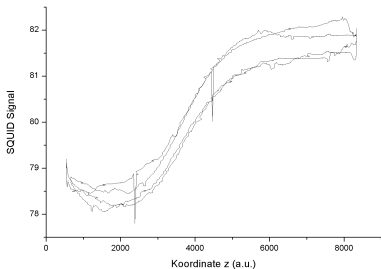
Volumen-Brillouin-Zone des fcc-Gitters sowie Oberflächen-Brillouin-Zonen der idealen (001) und (110)-Oberflächen. Einige hochsymmetrische Punkte sind eingezeichnet. Die Richtungen Δ , Σ und Λ entsprechen jeweils der Richtung $[001]$, $[110]$ und $[111]$.



Ergebnisse von EPR in Moskau



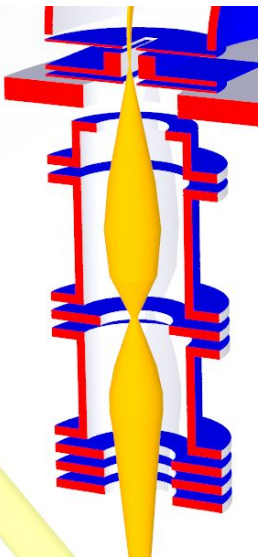
Ergebnisse von SQUID, ebenfalls Moskau



Inkohärente Ergebnisse

Die ortsaufgelösten Magnetfelduntersuchungen lieferten leider keine Erklärung der g-Faktoren, die mit EPR bestimmt worden waren (2,4 und 5,8). Benutzte Methode: SQUID (Superconducting QUantum Interference Device).

Fokussierung und Retardierung



Retardierungsoptik

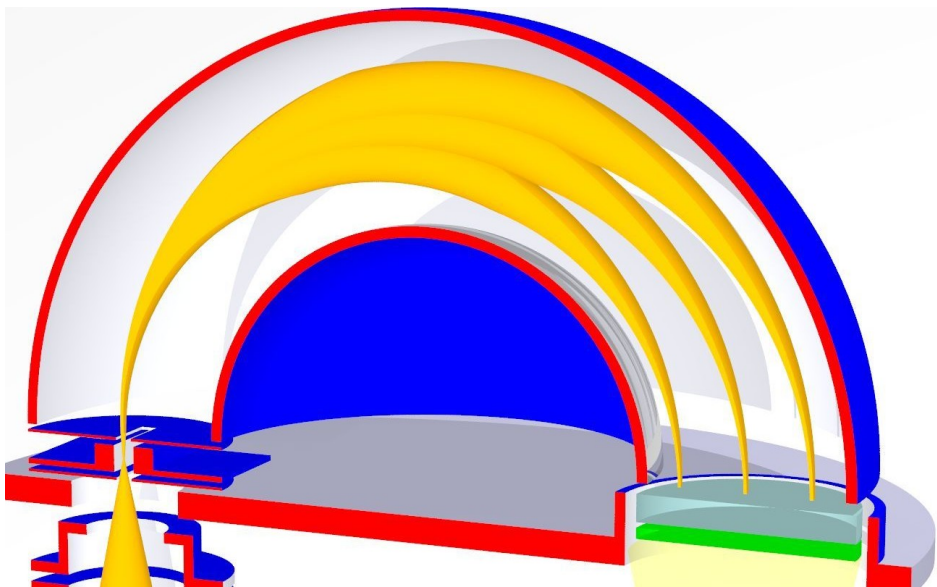
Die Elektronen passieren den Analysator mit einer fest definierten Energie. Dazu werden die Elektronen abgebremst, ohne ihre relative Energieverteilung zu ändern.
Gemessene kinetische Energie:

$$E_{kin,A} = E_{pass} - U_{ret}$$

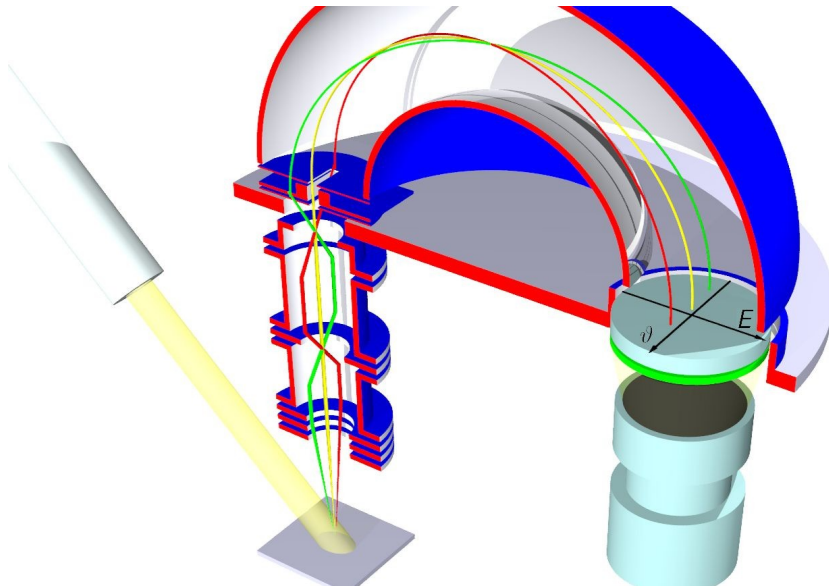
Negative kinetische Energie

$E_{kin,S}$	=	0.2 eV
U_{ret}	=	10.2 eV
U_K	=	-0.4 eV
E_{pass}	=	10 eV
$E_{kin,A}$	=	-0.2 eV

Energiedispersion innerhalb des Kugelkondensators



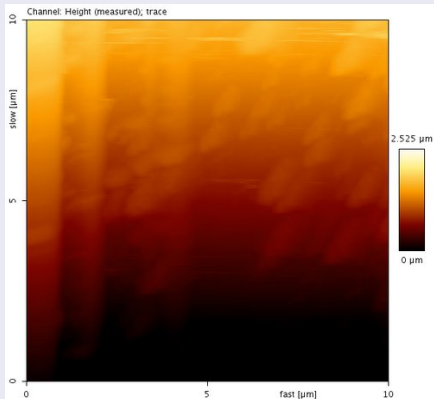
Winkelaufgelöste Messungen mit einem Scienta



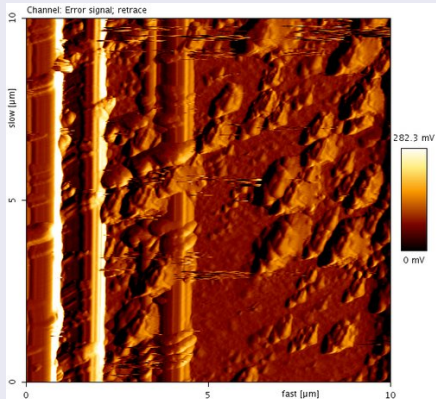
Überprüfung der Oberfläche mit AFM

AFM - Atomic Force Microscope (Atomkraftmikroskop)

Gemessene Höhe (trace)

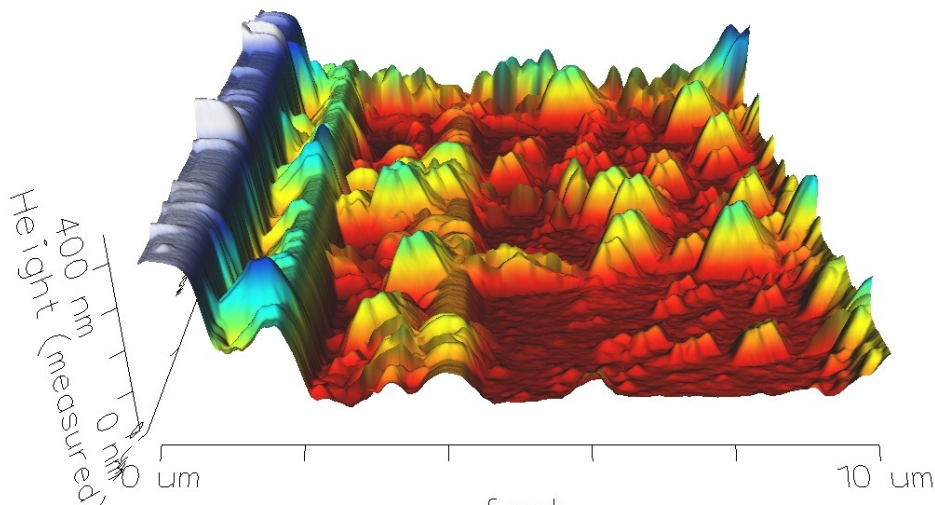


Fehlersignal (retrace)

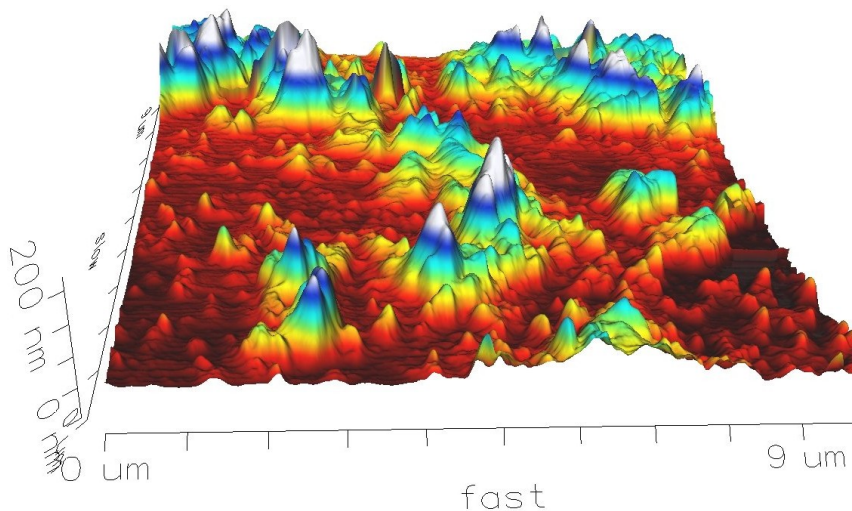


Darstellung der AFM-Messung in 3D

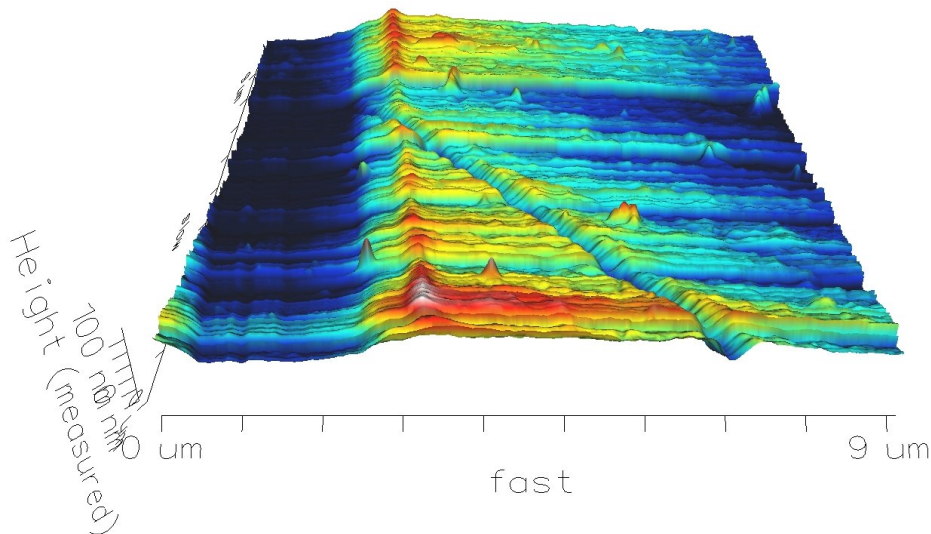
Die gemessene Höhe ist um den Faktor 20 verstärkt dargestellt.



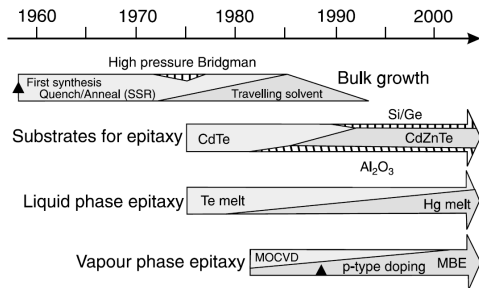
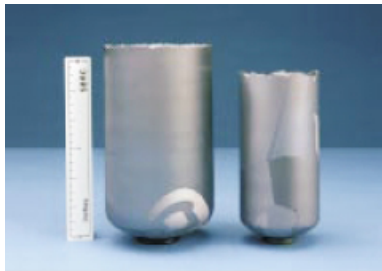
AFM-Bild der Oberfläche von Probe III ($x=0.2$)



AFM-Bild der Oberfläche von Probe V ($x=0.1955$)



Herstellung von CdHgTe



SEM Probe I ($x=0.07$) - PES in normaler Emission

