

Uso da espectroscopia Raman resolvida em ângulo para a caracterização de filmes finos de CdTe

Misael César Isaac Muniz; Luciano de M. Guimarães; Leonarde do N. Rodrigues; Eduardo Nery D. de Araújo; Wesley F. Inoch e Erika P. Pimenta

Indústria, inovação e infraestrutura

Pesquisa

Introdução

O Telureto de Cádmio (CdTe) é um semicondutor de gap direto amplamente usado em células solares e detectores por sua alta absorção óptica e facilidade de dopagem. Em filmes finos, a orientação cristalina e a qualidade estrutural influenciam diretamente as propriedades optoeletrônicas e a eficiência dos dispositivos, por isso, o controle da epitaxia nas primeiras camadas é crucial. O crescimento por epitaxia por feixe molecular (MBE) oferece controle preciso, mas pode gerar domínios mistos, tensões e reorientações estruturais que técnicas convencionais como a difração de raios X (DRX) têm dificuldade em identificar em filmes ultrafinos [1, 2]. A espectroscopia Raman, técnica óptica não destrutiva baseada na interação inelástica da luz com a rede cristalina ao incidir um laser monocromático sobre o material, é sensível à simetria e à orientação estrutural [1, 3]. Na configuração polarizada resolvida em ângulos, ela permite analisar a variação da intensidade dos modos ópticos com a rotação da amostra, identificando orientações preferenciais e domínios mistos [2]. Este trabalho investiga filmes de CdTe crescidos sobre substratos de GaAs e Si por meio de medidas resolvidas em ângulos, analisando a evolução dos padrões em função da espessura.

Objetivos

Identificar padrões angulares de modos ópticos que indiquem a simetria predominante em diferentes espessuras e avaliar a influência da orientação dos substratos na orientação de crescimento dos filmes.

Metodologia

Foram crescidas oito amostras de filmes finos de CdTe por MBE, variando-se a espessura e o substrato. As amostras foram medidas por espectroscopia Raman resolvida em ângulos utilizando um laser de 514,5 nm e girando a amostra por um motor de passos.

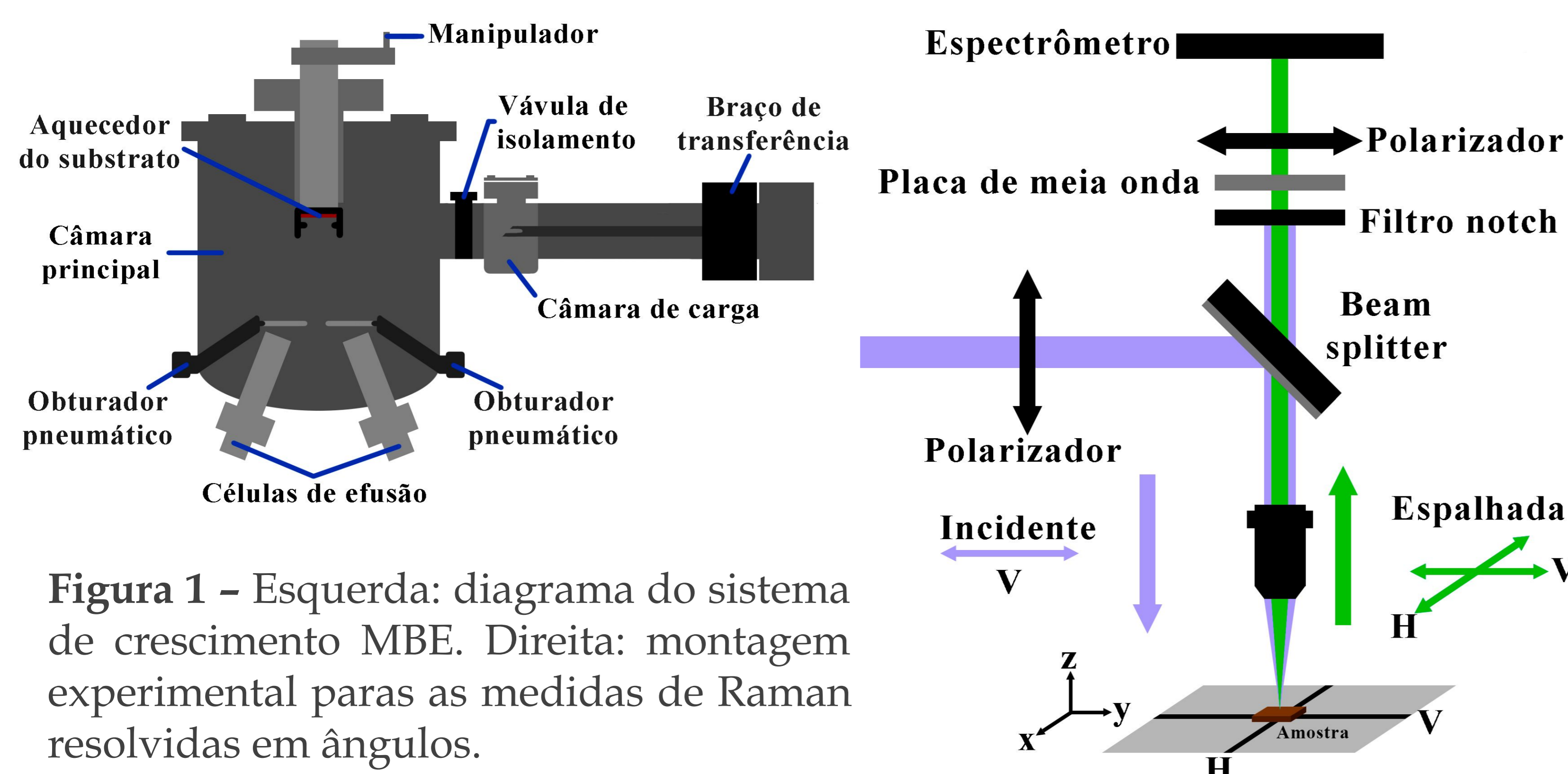


Figura 1 – Esquerda: diagrama do sistema de crescimento MBE. Direita: montagem experimental para as medidas de Raman resolvidas em ângulos.

Apoio Financeiro

Resultados

$$I^{\mu} \propto \left(e_x^i e_y^i e_z^i \right) \cdot \begin{pmatrix} R_{xx}^{\mu} & R_{xy}^{\mu} & R_{xz}^{\mu} \\ R_{xy}^{\mu} & R_{yy}^{\mu} & R_{yz}^{\mu} \\ R_{xz}^{\mu} & R_{yz}^{\mu} & R_{zz}^{\mu} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e_x^s \\ e_y^s \\ e_z^s \end{pmatrix}^2$$

Equação 1 – O tensor de espalhamento inelástico carrega informações sobre a simetria da estrutura que modula a intensidade do sinal espalhado em termos das polarizações de incidência e de espalhamento [3].

#	CdTe (100)	Espessura do Filme	#	CdTe (111)	Espessura do Filme
A)	GaAs	50 nm	E)	GaAs	40 nm
B)	GaAs	100 nm	F)	GaAs	150 nm
C)	GaAs	200 nm	G)	Si	250 nm
D)	GaAs	500 nm	H)	Si	1000 nm

Tabela 1 – Espessuras dos filmes de CdTe (100) e (111) e seus substratos.

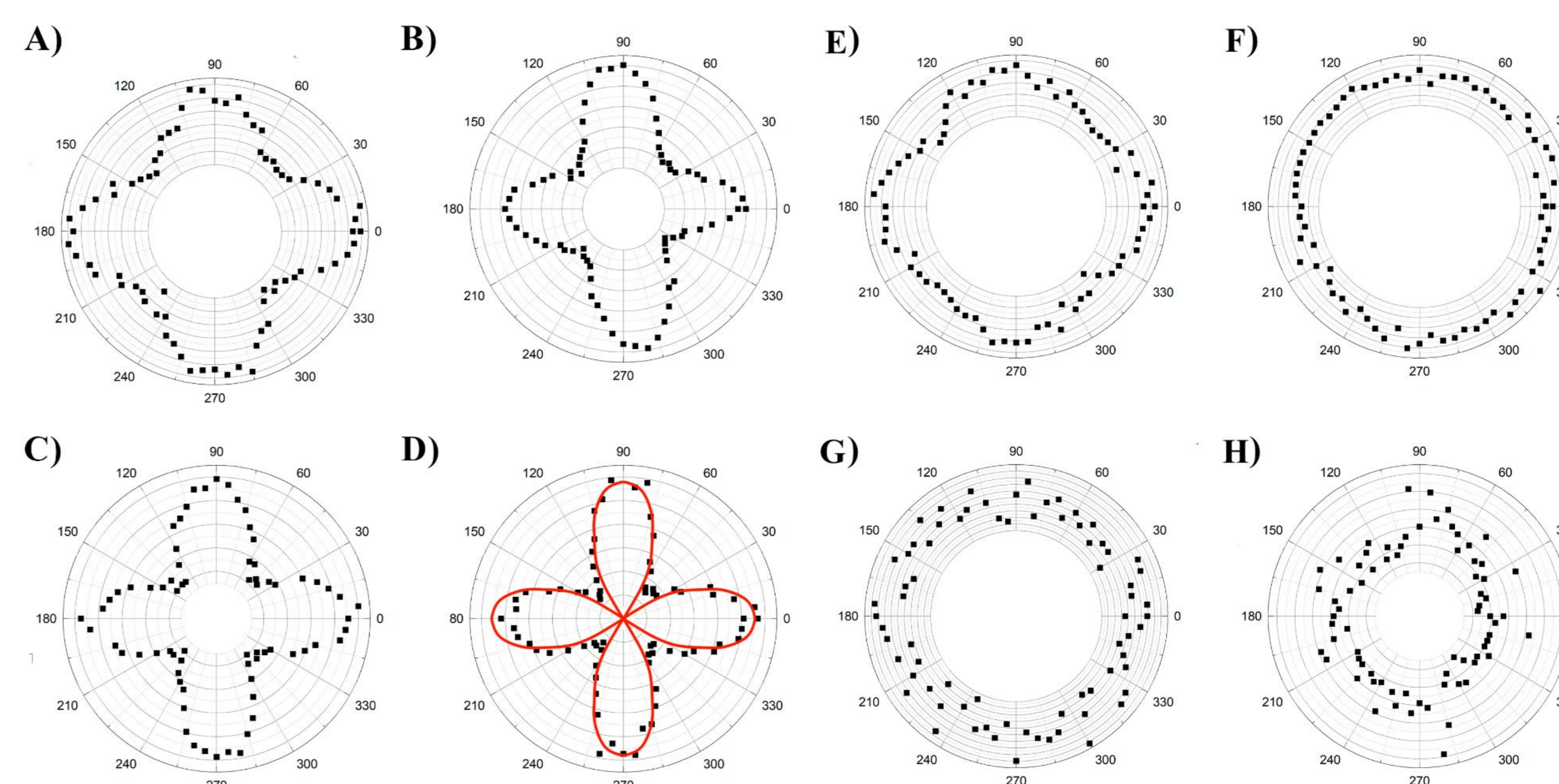


Figura 2 – Gráficos polares do fônon LO de CdTe em diferentes substratos e orientações, obtidos por Raman resolvido em ângulos em geometria VV. Pontos pretos: dados experimentais; linha vermelha: modelo teórico baseado em [1].

Conclusões

A partir da espectroscopia Raman polarizada resolvida em ângulo, observou-se que os filmes de CdTe depositados sobre substratos de GaAs (100) apresentam, nas primeiras etapas de crescimento, uma coexistência de domínios orientados em (100) e (111). Com o aumento da espessura, ocorre uma evolução clara em direção à predominância da orientação (100), indicando um processo de reorientação associado à relaxação de tensões e ao ajuste da rede cristalina ao substrato. Em contraste, os filmes crescidos sobre substratos (111), tanto de GaAs quanto de Si, mantiveram orientação estável ao longo de todas as espessuras estudadas, evidenciando uma relação epitaxial mais favorável. Esses resultados fornecem portanto informações locais sobre simetria e distribuição de domínios que dificilmente são acessíveis por outros métodos de caracterização.

Bibliografia

- [1] STEELE J. et al. J. Appl. Phys. 120 (2016) n.5.
- [2] INOCH W. F. et al. Nanoscale 17 (2025) 15279.
- [3] PIMENTA M. A. et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 23 (2021) 27103.