

## EBE로 증착된 반도체 CdZnTe 박막의 결정구조와 표면조성

박국상, 김선옥, 이기암  
단국대학교 물리학과, 천안, 330-714

### The structure and the surface composition of semiconductor CdZnTe films by EBE

Kook - Sang Park, Sun - Ock Kim and Ky - Am Lee  
*Department of Physics, Dankook University, Cheonan 330-714, Korea*

요 약 유리기판(Corning 7059) 위에 Electron Beam Evaporator(EBE)로 진공 중에서 증착된  $Cd_{1-y}Zn_yTe$ (CZT) 박막의 표면 조성비와 결정구조를 조사하였다. 증착시 기판의 온도는 각각 실온과 300°C였으며, 열처리는 압력  $1 \times 10^{-6}$  torr하에서 300°C에서 1시간 동안 행하였다. 증착된 CZT 박막의 표면조성비는 Cd원자가 상대적으로 약 4% 정도 부족하였고, Zn원자는 비교적 안정하였다. 박막의 구조는 거의 cubic phase인 다결정(polycrystal)이었다. 400°C에서 측정된 X-선 분말 회절상으로부터 구한 격자상수 값으로부터 계산된 열팽창 계수는  $6.30 \times 10^{-6}/^{\circ}C$ 이었다. 박막은 열처리에 의하여 회절상의 peak가 증가하였으나 기판의 온도가 결정화에 더 큰 영향을 미치는 것으로 판단된다.

**Abstract** We have investigated the surface composition and the structure of the  $Cd_{1-y}Zn_yTe$  films evaporated on the glass substrates (Corning 7059) by Electron Beam Evaporator (EBE) in pressure of approximately  $1 \times 10^{-6}$  torr. The substrate temperatures were held at both room temperature and 300°C, and the samples have annealed for an hour at 300°C. The surface composition of the as-prepared films were slightly different from those of CdZnTe source material. Cd losses on the CdZnTe surface was measured about 4% of atomic ratio at room temperature substrate, whereas Zn atomic ratio was nearly constant, relatively. The structure is observed to be polycrystalline whose phase is mainly cubic phase. Thermal expansion coefficient was  $6.30 \times 10^{-6}/^{\circ}C$  which was calculated from the variation of lattice parameter by X-ray powder patterns measured at 400°C. Diffraction peaks were slightly increased by annealing for an hour at

300 °C, but they were highly affected by substrate temperature during evaporation.

## 1. 서 론

삼원소 화합물 반도체  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  (MCT,  $x$ 는 at%)는 입방 Zinc blende 구조를 가진 CdTe와 HgTe의 합성 고용체로서 장파장의 적외선 검지기(IR detector) 소자 및 광통신 수신 소자 재료로서 유용한 반도체이다. CdTe는 에너지 갭(energy gap)이 1.48 eV 이고, HgTe는 반금속(semimetal)으로서 전도대(conduction band)와 가전자대(valence band)가 0.3 eV 만큼 겹쳐진(overlap) 에너지 갭을 갖는 데, 이 두 화합물로부터 만들어진 MCT는 조성비  $x$ 가 증가됨에 따라 에너지 갭이 거의 선형적으로 증가한다[1,2]. 대기의 투과창(atmospheric window)은 적외선 영역에서 3~5  $\mu\text{m}$ 와 8~14  $\mu\text{m}$ 의 두 영역이 있으며, MCT의 조성비  $x$ 를 적절히 조절하고 동작 온도를 고려하면 이 영역에서 적외선 검지기로서 사용이 가능하다.

CdTe는 MCT를 박막으로 성장시킬 때 기판으로 널리 사용되고 있다. 이 때 성장된 MCT 박막 내부에 존재하는 선결함은 두 가지로 나누어 보면 그 하나는 misfit 전위로서 CdTe 기판과 MCT의 격자 부정합(lattice mismatch)에 의해 형성되며, 다른 하나는 threading 전위로서 CdTe 기판에 존재하는 전위가 MCT에 그대로 전파되어 발생된다[3,4]. 이와 같은 MCT 박막 내부의 전위들은 소수 운반자 수명을 감소시키고, 특히 광전압형 소자(photovoltaic device)의 제작시 누설전류를 증가시켜 적외선 검지기의 성능을 저하시키는 원인이 될 수 있다[5]. 이러한 문제점을 해결하기 위하여 기판 재료인 CdTe에 Zn를 적절히 첨가하여 MCT의 격자

상수와 거의 같게하여 격자부정합을 줄이고 기판의 결정성도 향상시키려는 연구가 진행되어 왔다[6,7].

$\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  (CZT,  $y$ 는 at%)는 MCT 박막을 얻기 위한 기판, 완충층(buffer layer)이나 MCT의 optical coating용 박막등으로 사용될 수 있다. Fig. 1은 MCT와 CZT의 조성 변화에 따라 그려진 격자상수의 그래프이다. 파장영역 3~5  $\mu\text{m}$ 와 8~14  $\mu\text{m}$  영역의 적외선을 탐지할 수 있는 MCT의 조성은 에너지 밴드 갭(energy band gap)을 고려할 때, 조성비  $x$ 가 각각 0.3과 0.2이고 이 때의 격자상수는 각각 6.465 Å과 6.464 Å이다. 한편 Sher등에 따르면 기판과 그 위에 성장되는 박막의 격자 부정합도가  $10^{-3}$  이하일 때 결정성이 우수한 것으로 알려져 있으며

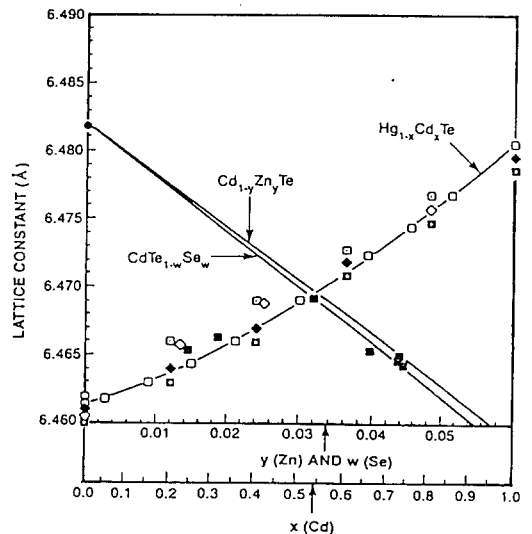


Fig. 1. Lattice constant variations as a function of composition in the system  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  and  $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$  [8].

[9], Fig. 1에서 보는 바와 같이  $x$ 가 0.21일 때 이러한 격자정합을 얻기 위해서 CZT의 조성은  $y$ 가 0.04 ~ 0.05의 범위에 들어야 한다. 또한 CZT는 직접전이(direct transition)형 반도체로서 Fig. 2를 보면 광학적 에너지 밴드 갭이 조성비 증가에 따라 CdTe(1.48 eV)에서 ZnTe(2.21 eV)까지 거의 선형적으로 변화한다. CZT의 cut-on 에너지( $E_{co}$ )는 조성비  $y$ 가  $0 \leq y \leq 0.2$  영역에서 온도 300 K일 때[10],

$$E_{co} = 1.4637 + 0.49613y + 0.22890y^2$$

이고, 두께( $t$ )에 대한 보정식

$$\Delta\lambda_{\infty} = -7.520 + 10.65t - 3.143t^2$$

(0.8 mm  $\leq t \leq$  1.2 mm)

를 고려하면 흡수대가 가시광 영역에 있으므로 이 영역에서 광전소자로서 사용이 가능하다.

본 연구는 조성비  $y$ 가 0.04인 합성된 CZT를 Electron Beam Evaporator(EBE)를 사용하여 CZT 박막을 유리 기판 위에 기판의 온도

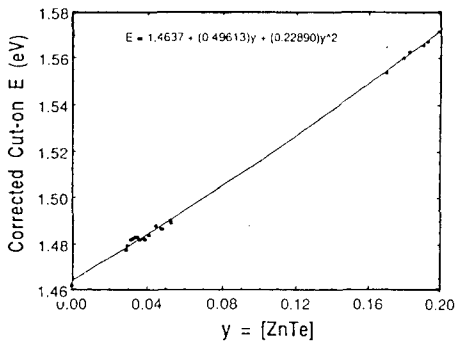


Fig. 2. 300 K cut-on energy vs composition for CZT samples with thickness 1 mm over the range ( $0 \leq y \leq 0.2$ ) [10].

를 달리하여 증착하였으며, 증착된 CZT 박막은 열처리 온도를 달리하여 Energy Dispersive Spectroscopy(EDS) 측정으로 박막의 표면조성과 X-ray diffractometer(XRD)를 이용하여 결정구조적 특성들을 조사하였다.

## 2. CZT의 결정구조

CZT 결정은 입방 Zinc blende 구조를 가지며, 공간군(space group)  $F\bar{4}3m$ 으로서 한 쪽 FCC 격자점에 Cd 또는 Zn 원자를 놓고 다른 FCC 격자점에는 Te 원자를 둠으로써 얻어진다. Fig. 3은 Zinc blende 구조를 나타내며 각 원자들은 이웃 원자들과 사면체 결합(tetrahedral bond)을 하고 있다. J.C. Wooley등에 따르면 조성비  $y$ 가 증가됨에 따라 격자상수는 Fig. 4와 같이 감소한다[11].

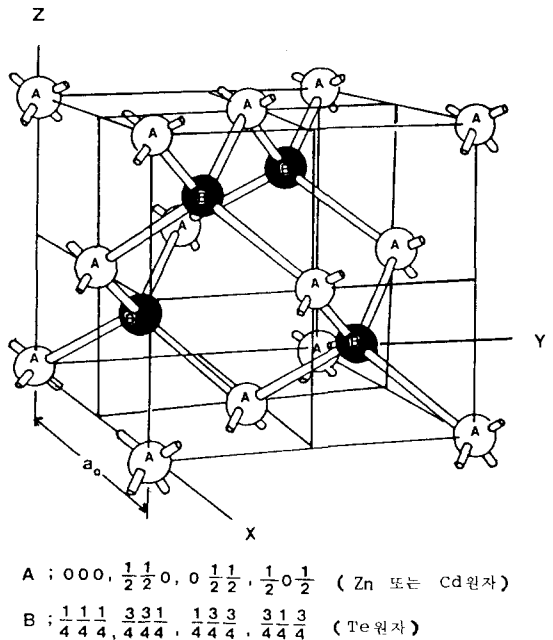


Fig. 3. Crystal structure of zinc blende [1].

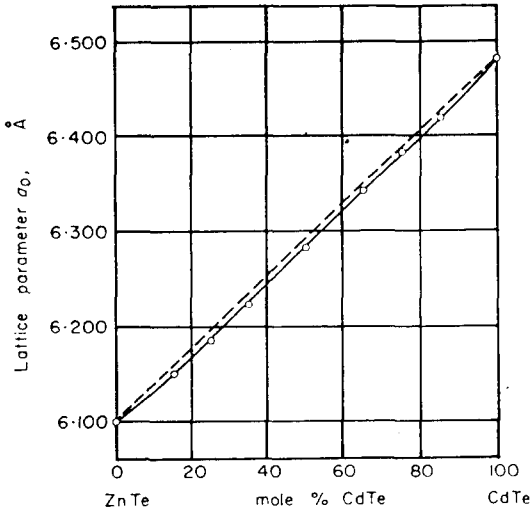


Fig. 4. Variation of lattice constant as a function of composition in the system CdTe and ZnTe [11].

격자상수는 Vegard line으로 부터 약간 편차가 있고 최대편차 0.004 Å으로 알려져 있다. A. Tanaka등에 따르면  $Cd_{1-y}Zn_yTe_{1-z}Se_z$ 계의 조성비 변화에 따른 격자상수( $a_0$ )는 상온에서

$$a_0(\text{Å}) = 6.4825 - 0.31y - 0.41z \quad (1)$$

이고[12], 한편 MCT에서 조성비 변화에 따라 실험적으로 측정된 격자상수는

$$a_0(\text{Å}) = 6.46153 + (0.73617x + 1.90501x^2 - 0.69347) \times 10^{-2} \quad (2)$$

으로 알려져 있다. 따라서 식 (1) 및 (2)로부터  $x$ 가 0.21일 때 MCT의 격자상수는 6.4639 Å이고, 이 때 CZT계의 격자정합은 Vegard line으로 부터 편차를 고려하여  $y$ 가 0.04 ~ 0.05 영역에서 이루어진다.

### 3. X-선 회절상의 계산

조성비 변화에 따라 회절선들의 강도와 회절각의 변화를 보기 위하여 X-선 회절강도를 계산하였다. X-선 분말법(powder method)에서 회절 강도  $I_{hkl}$ 은

$$I_{hkl}(\theta) = |S_{hkl}|^2 P_{hkl} \left( \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) A(\theta) \exp(-2M) \quad (3)$$

으로 주어지는 데[13], 여기서  $|S_{hkl}|^2$ 은 구조(structure) 인자의 제곱,  $P_{hkl}$ 은 다중도(multiplicity) 인자,  $I_{hkl}(\theta) = |S_{hkl}|^2 P_{hkl} \left( \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right)$ 은 로렌츠 및 편광(Lorentz-Polarization) 인자,  $A(\theta)$ 는 흡수(absorption) 인자, 그리고  $\exp(-2M)$ 은 온도(temperature) 인자이다. 조성비  $y$ 가 달라질 때 CZT 결정의 회절각 및 회절강도의 변화를 계산하였다. Fig. 3에서  $Cd_{1-y}Zn_yTe$  결정구조의 단위 격자 내의 이온의 위치 ( $u, v, w$ )는 각각 Cd 또는 Zn원자의 경우 (0, 0, 0), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)에, 그리고 Te원자는 (1/4, 1/4, 1/4), (1/4, 3/4, 3/4), (3/4, 1/4, 3/4), (3/4, 3/4, 1/4)에 조성비  $y$ 에 따라 위치한다. 구조인자  $S_{hkl}$ 은

$$S_{hkl} = \sum_j \exp[2\pi i(hu + kv + lw)] \text{로부터}$$

$$S_{hkl} = [1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(l+h)}]$$

$$[((1-y)f_{Cd} + (y)f_{Zn}) + f_{Te} e^{\frac{\pi}{2} i(h+k+l)}]$$

이고, 여기서 원자 산란인자  $f_{Cd}$ 와  $f_{Zn}$ 은 (0, 0, 0), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)의 각 위치에 각각 (1-y)와  $y$ 의 비

율로 분배된다고 가정하였다.  $h, k, l$ 이 모두 홀수이면 구조인자의 제곱 ( $|S_{hkl}|^2$ )은

$$|S_{hkl}|^2 = [(1-y)f_{Cd} + (y)f_{Zn}]^2 + (4f_{Te})^2$$

이다.  $h, k, l$ 이 모두 짝수일 때 ( $h+k+l$ )이  $4n$  ( $n$ 은 정수)이면

$$|S_{hkl}|^2 = [(1-y)f_{Cd} + (y)f_{Zn} + 4f_{Te}]^2$$

이고, ( $h+k+l$ )이  $(4n+2)$ 이면

$$|S_{hkl}|^2 = [(1-y)f_{Cd} + (y)f_{Zn} - 4f_{Te}]^2$$

이다. 한편  $h, k, l$ 이 혼합지수이면

$$|S_{hkl}|^2 = 0$$

이다. 따라서 회절선들은 비혼합지수를 갖는 결정면에서 관측된다. 구조인자 외에 회절강도에 영향을 주는 요소들을 고려하여 측정되는 X-선의 회절상의 강도분포가 Lorentzian 함수 형태를 갖는다면 최종적으로 분말법으로 측정한 회절상  $I_s(2\theta)$ 는 다음과 같이 주어진다[14].

$$I_s(2\theta) = \sum_p \frac{I_p(2\theta\gamma)}{(2\theta - 2\theta_p)^2 + \frac{\gamma^2}{4}} \quad (4)$$

여기서  $p$ 는 회절상의 번호이고,  $\gamma$ 는 선폭이며,  $\theta_p$ 와  $I_p$ 는 각 결정면 ( $hkl$ )에 의한 회절상의 각도와 회절강도의 세기로부터 계산된다.

Fig. 5는 조성비  $y$ 가 각각 0.00, 0.25, 0.50, 0.75 및 1.00일 때 식(4)로부터 X-선 회절강도를  $y=0.00$ 의 (111) peak의 회절강도를 기준으로 상대적으로 계산하여 선폭

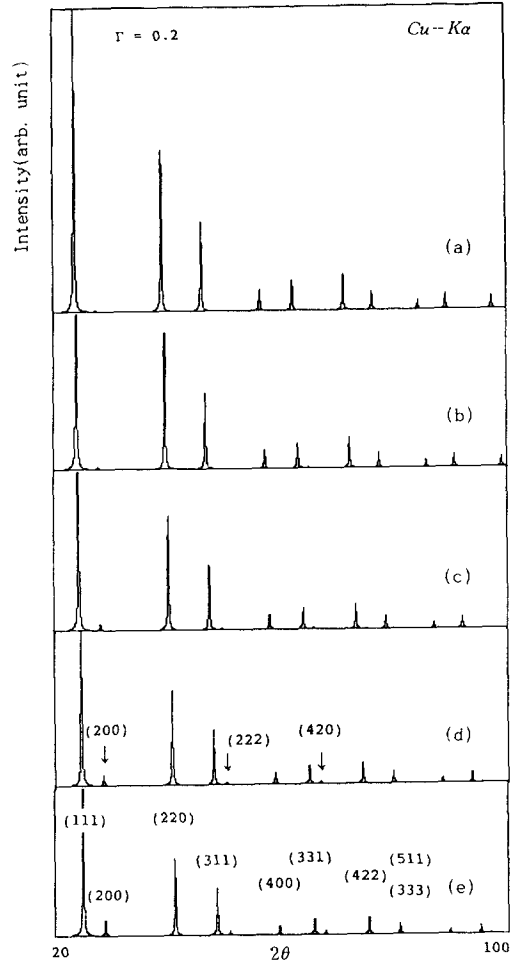


Fig. 5. X-ray diffraction spectra of CZT powder specimens calculated theoretically [(a)  $y=0.00$ , (b)  $y=0.25$ , (c)  $y=0.50$ , (d)  $y=0.75$  and (e)  $y=1.00$ ].

$\gamma$ 를 2로 가정하여 그린 회절상들이다. 조성비가 증가할 때 회절선의 회절강도가 전체적으로 작아지는 한편 (200), (220) 및 (420)면 등에서 크기의 비가 뚜렷이 증가되어 나타난다. 조성비가 증가함에 따라 격자상수가 감소하여 peak의 회절각이 점차 증가하는 쪽으로 편이(shift)되었다. Fig. 6은 (200) peak를 확대하여 그린 것으로서 조성비가

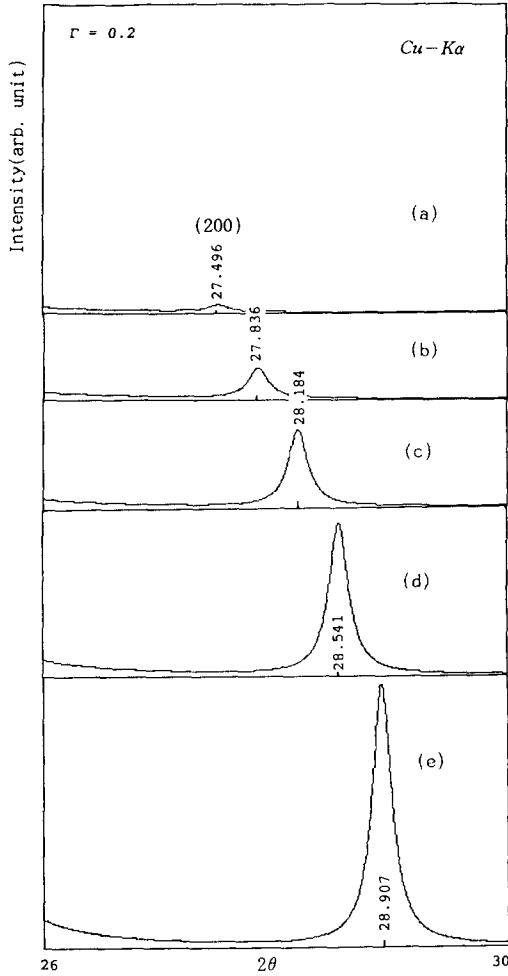


Fig. 6. Diffraction intensity and angle of (200) peak expanded in the region ( $26^\circ \leq 2\theta \leq 30^\circ$ ).

증가하면 회절각은 커지고, 회절강도는 상대적으로 커지는데 이는 Zn 원자와 Te 원자의 원자산란인자의 차이에 기인된다. Fig. 7은 Cu-Kα Target을 사용하여 y가 0.04일 때, 계산된 회절상과 상온에서 실험으로 측정된 회절상이다. 그림에서 두 회절상은 잘 일치하고 cubic phase임을 명백히 알 수 있다. 만일 조성비가 0.5일 때 Zn 원자가 (0, 0, 0),

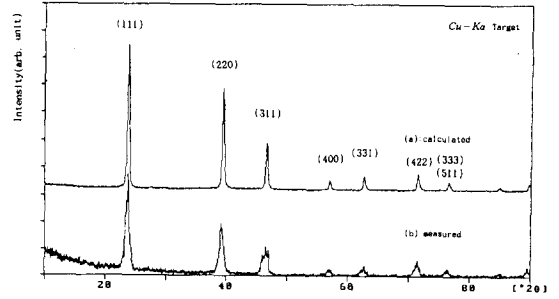


Fig. 7. X-ray diffraction spectra of CZT powder specimens having composition of  $y = 0.04$  [(a) calculated and (b) measured].

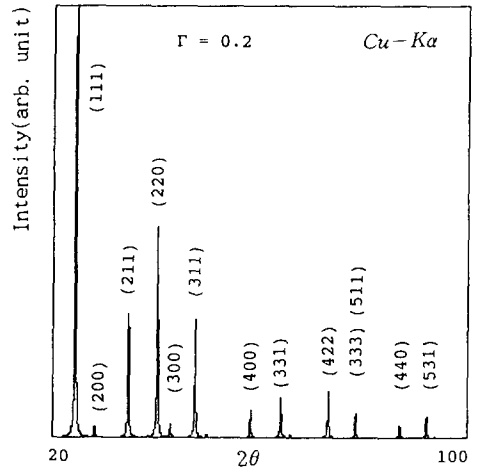


Fig. 8. X-ray diffraction spectra of CZT powder specimens calculated theoretically in the case of atomic position [Zn : (0, 0, 0), (0, 1/2, 1/2) and Cd : (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)].

(0, 1/2, 1/2)인 특정한 위치에 위치하고 Cd 원자가 그 외의 두자리 (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)에 위치한다면, 구조인자를 계산해 볼 때 혼합지수 ( $h, k, l$  짝 홀수 혼합)에서

$$|S_{hkl}|^2 = (f_{Cd} - f_{Zn})^2 \quad (5)$$

이 되어 Fig. 8처럼 입방 Zinc blende 구조에서 보이지 않는 회절선 (211), (300) peak 등이 나타난다. 그러나 다른 회절선들의 상대강도비는 크게 변하지 않는다.

## 4. 실험

### 4.1. CZT 박막의 준비

CZT 시료는 원료 물질인 Cd, Zn, 그리고 Te (Osaka Asahi Metal MFG. Co. LTD, 6NS)를 원자량 비율로 칭량하여  $10^{-5}$  torr로 봉입된 석영관 내에서 합성되었다. 합성된 시료의 표면의 산화물과 불순물을 제거하기 위하여 Nakagawa 에칭액(HF 30 cc : H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 20 cc : H<sub>2</sub>O 20 cc)으로 1분 동안 에칭한 후에 메탄올과 탈이온수로 초음파 세척기에서 세정하였다. 이 시료를 EBE 장치(Korea Vacuum Co. KVG-663)를 사용하여 glass (Corning 7059) 기판 위에 증착하였다. 성장시 Electron Beam Gun의 출력은 10 W, 증착 중 진공도는  $1 \times 10^{-6}$  torr이었다. 기판의 온도는 각각 실온과 300°C, 증착률은 1 Å/s 와 2 Å/s으로 하였다. 열처리는 압력  $5 \times 10^{-6}$  torr인 진공조 안에서 할로겐 램프로 약 10분간 가열하여 300°C까지 올린 후 1시간 동안 이 상태를 유지하고, 그 이후는 질소를 유입하여 냉각을 하였다. 두께 측정은 증착하는 과정 중에 SYCON 사의 STM-100/MF Thickness/Rate Monitor를 사용하였는데, 이는 ellipsometer를 사용해서 두께를 측정 한 후 이와 비교하여 tooling factor를 정하여 보정하였다. 박막의 두께는 100 Å, 300 Å, 500 Å, 1000 Å, 3000 Å 및 5000 Å으로 하여 증착되었다.

### 4.2. 박막의 조성

박막의 표면 조성은 Energy Dispersive Spectroscopy (EDS, HITACHI Scanning Electron Microscopy S-2500C)로 측정하였고, Cd : Zn : Te의 원자량비(at%)이 45.20 : 4.58 : 50.22인 CZT로부터 증착된 박막의 표면 조성비는 기판 온도가 실온일 때 41.31 : 3.95 : 54.74, 기판온도가 300°C일 때 41.02 : 4.53 : 54.45이었으며, 실온에서 300°C까지 열처리에 의하여 조성비는 41.62 : 4.13 : 54.25로서 모두 Cd원자가 약 4% 정도 부족하였고 Zn원자는 상대적으로 안정하여 변화는 거의 없었다. Fig. 9는 기판 온도가 실온일 때 EDS로 가속전압 15 kV 하에서 측정된 spectrum이다.

### 4.3. X-선 회절실험

X-선 회절상은 X-ray diffractometer (Philips PW3710 BASED)로 Cu-K $\alpha$  (1.5406 Å)를 사용하여 측정되었다. 회절각(2

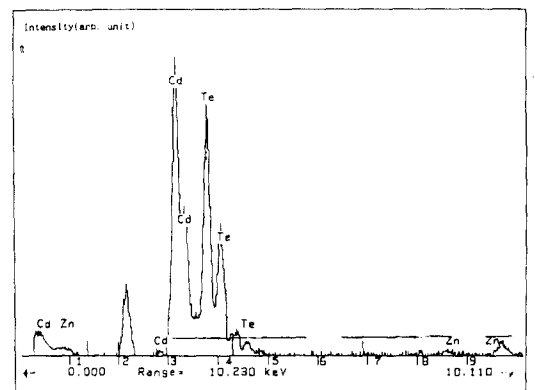


Fig. 9. EDS spectrum for the measurement of atomic ratio in the CZT film evaporated on the room temperature substrate.

$\theta$ )은  $10^\circ \sim 90^\circ$ , step의 크기는  $0.02^\circ$ , 그리고 step당 시간은 0.50초 이었다.

5. 실험결과 및 분석

Fig. 10은 측정된 CZT 결정( $y=0.04$ )의 X-선 분말 회절상이고, Table 1은 각각 실온 및  $400^\circ\text{C}$ 에서 측정된 X-선 회절 상대강도이다. 이 CZT는 측정된 회절각의 위치로 보아 입방 Zinc blende 구조를 가진 결정이며, Cohen 방법으로 구한 격자상수는  $6.4618 \text{ \AA}$  이다[13]. Fig. 10에서 실험으로 측정된 회절상을 보면 혼합지수면의 회절상은 보이지 않으며, 식(5)와 비교하면 Cd와 Zn원자들은 조성비에 따라  $(0, 0, 0)$ ,  $(0, 1/2, 1/2)$ ,  $(1/2, 0, 1/2)$  및  $(1/2, 1/2, 0)$ 의 각 위치에 균등하게 분포됨을 알 수 있다. Fig. 10(b)는  $400^\circ\text{C}$ 에서 측정된 분말의 X-선 회절상을 실온에서 측정한 회절상 (a)와 비교한 그래프이고, 회절각  $2\theta$ 를  $55^\circ \sim 90^\circ$ 까지 확대하였

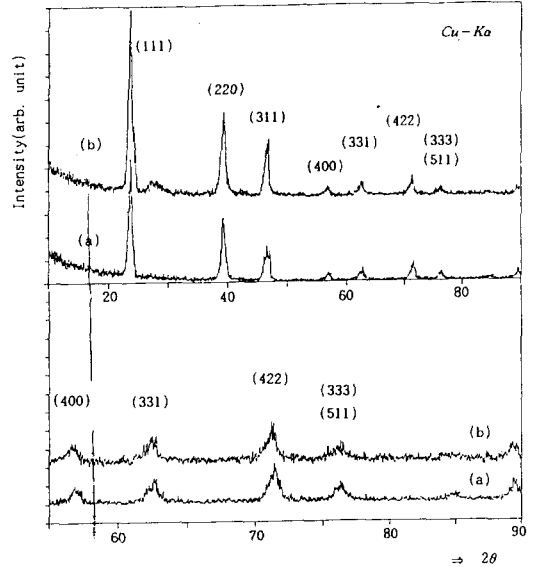


Fig. 10. X-ray diffraction spectra of  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  powder specimens measured experimentally in the (a) room temperature and (b)  $400^\circ\text{C}$ , which is expanded in the region of  $(55^\circ \leq 2\theta \leq 90^\circ)$ .

Table 1

X-ray diffraction intensities of  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  powder specimens measured experimentally in the (a) room temperature and (b)  $400^\circ\text{C}$ , respectively.

[ 회절강도는 (111)기준 ]

결정면(hkl)	실 온		400 °C	
	회절각(2θ)	회절강도	회절각(2θ)	회절강도
(111)	23.840	100	23.660	100
(220)	39.130	56.6	39.205	43.8
(311)	46.450	29.5	46.690	32.1
(400)	56.925	6.1	56.735	4.5
(331)	62.695	9.9	62.510	5.2
(422)	71.490	16.0	71.280	7.8
(511)	76.210	5.7	76.250	2.6



다. 격자상수는 400°C에서 6.4780 Å로서, 이로 부터 열팽창 계수를 계산하면  $6.30 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ 이고 이를 CdTe의 열팽창계수  $5.9 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ (300K)와 비교하면 박막인 경우 약간 크다. Fig. 11은 기판의 온도를 실온에서 300°C까지 100°C 간격으로 변화시키며 증착률 1 Å/s로 성장된 박막(두께 5000 Å)의 X-선 회절상이다. 첫번째 peak는 2θ가 23.78°에서 나타나며, 이는 입방 Zinc blende 구조의 (111) peak이고, 기판의 온도가 300°C일 때 (220), (311) peak가 나타나 결정성이 뚜렷해진다. 그러나 이 박막에서 결정면의 우선배향을 확실히 알 수는 없다. Fig. 12는 두께를 1000 Å, 3000 Å 및 5000 Å으로 하여 측정된 회절상이고, 박막의 두께가 두꺼워짐에 따라 (111) peak가 커지는 것으로

보아 결정성이 향상된 것으로 보인다. 이는 기판이 비결정 glass일 때는 얇은 박막 보다는 박막이 두꺼워졌을 때 결정화가 더 이루어진 것으로 보인다.

Fig. 13은 증착률을 2 Å/s로 높여 증착된 박막을 300°C에서 1시간 열처리하여 측정된 X-선 회절상을 실온에서 측정된 회절상과 비교한 것으로서 열처리된 박막이 실온에서 증착된 박막에 비하여 (220)과 (311)의 peak가 약간 증가하였다.

Fig. 14는 열처리된 박막의 (111) peak의 회절선의 강도를 같은 X-선 회절 실험 조건에서 실온에서 증착된 박막의 (111) peak와 비교한 것으로서, 열처리된 박막의 회절강도

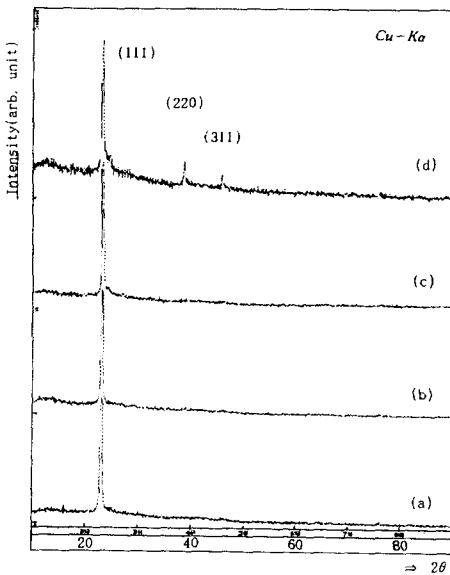


Fig. 11. X-ray diffraction spectra of CZT films with growth rate 1 Å/s as the variations of substrate temperature in the (a) room temperature, (b) 100°C, (c) 200°C and (d) 300°C, respectively.

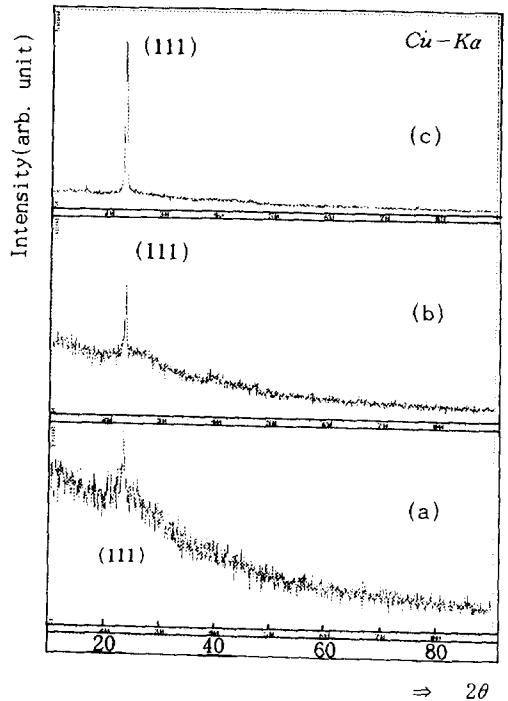


Fig. 12. X-ray diffraction spectra of CZT films with growth rate 1 Å/s as the variations of film thickness [(a) 1000 Å, (b) 3000 Å, (c) 5000 Å].

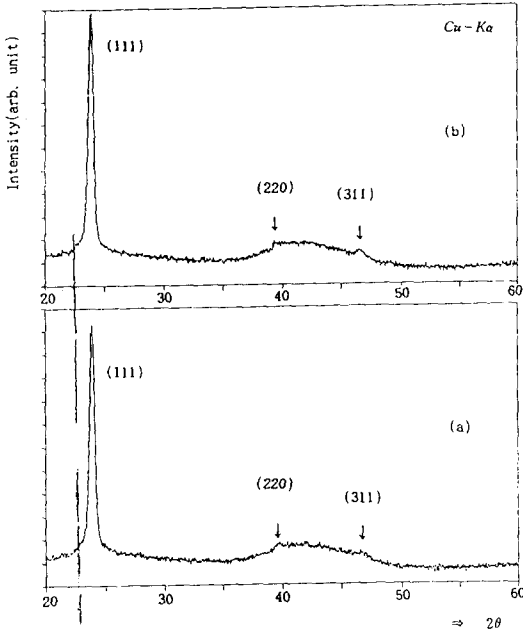


Fig. 13. X-ray diffraction spectra of CZT film (a) with growth rate 2 Å/s in the room temperature and (b) annealed for 1 hr at 300 °C, respectively.

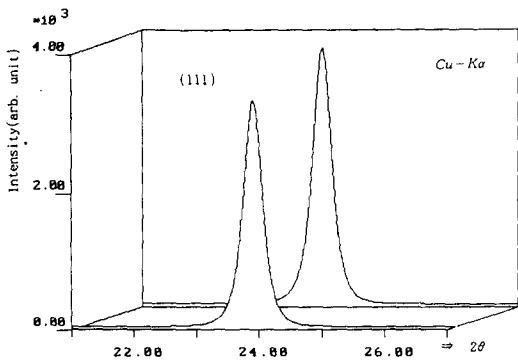


Fig. 14. A comparison of diffraction intensity scattered in (111) plane in (a) the room temperature substrate and (b) the CZT film annealed for 1 hr at 300 °C.

가 약 13 % 정도 증가되었다. 이것으로 보아 열처리된 박막은 결정성이 약간 증가된 것으로 판단된다. CZT 박막은 거의 cubic phase이지만 증착률이 2 Å/s일 때 hexagonal phase가 약간 혼재되어 있을 가능성이 있다. 이 박막에서 cubic phase의 (111) peak와 hexagonal phase의 (002) peak의 회절각이 비슷하여 이를 구분하기는 어렵다. 회절강도가 35°와 50° 사이에서도 관측되는데, 이는 cubic phase와 hexagonal phase의 결정면등이 포함된 여러 grain들이 다양하게 혼재되어 있는 것으로 추측된다. Fig. 15는 기판의 온도를 300 °C로 하여 증착된 박막의 회절상을 실온에서 증착된 박막과 비교한 것

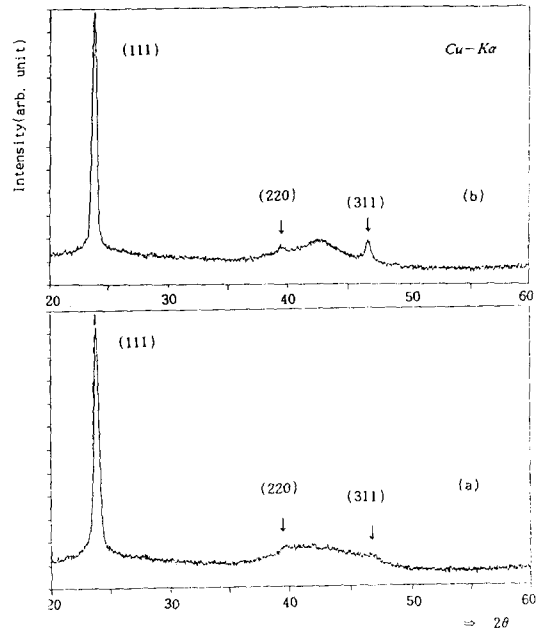


Fig. 15. X-ray diffraction spectra of CZT films with growth rate 2 Å/s as the variations of substrate temperature in the (a) room temperature and (b) 300 °C, respectively.

으로서 (220)과 (311)의 peak가 두드러지게 증가되었다. CdTe의 성장온도가 300°C 근처일 때 가장 잘 이루어지는 것으로 보아 열처리 효과 보다는 기판온도가 결정화에 더 큰 영향을 미치는 것으로 판단된다.

## 6. 결 론

CZT 박막은 진공 중에서 EBE를 사용하여 유리기판 위에 증착되었으며, 조성비는 EDS 그리고 결정구조는 XRD를 사용하여 조사되었다. 기판의 온도와 열처리 온도를 변화시켜 구조적 특성을 살펴보았다.

1) 합성된 CZT는 입방 Zinc blende 구조를 가진 결정이다. Zn원자등이 각 격자점에 고루 분포되지 않고 분포된 위치가 특정적일 때 회절상에 나타나는 혼합지수면이 없으므로 Cd와 Zn원자는 네 격자점 (0, 0, 0), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)에 조성비 분률에 따라 평균적으로 분포된다.

2) EBE로 진공 중에서 증착된 박막의 표면 조성은 증착조건 및 열처리에 의하여 Cd 원자의 원자량분률이 상대적으로 약 4% 정도 달라지며, 반면 Zn의 것은 비교적 안정적인 임을 알 수 있다.

3) 실온에서 측정된 X-선 분말 회절상에서 Cohen method로 구한 격자상수는 6.4618 Å 이고, 400°C에서 6.4780 Å으로 부터 계산된 열팽창 계수는  $6.30 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$  이었다.

4) 기판의 온도가 300°C일 때 증착률이 1 Å/s이 경우 회절강도가 증가하고 새로운 peak가 두드러지므로, 기판의 온도가 300°C일 때 온도가 낮은 기판 보다 더 결정화가 잘 이루어진다고 판단된다.

5) 증착률이 2 Å/s일 때 열처리에 의하여 회절상의 peak가 증가하였으나 기판온도가

결정화에 더 큰 영향을 미치는 것으로 판단된다.

## 참 고 문 헌

- [ 1 ] Donald Lang and Joseph L. Schmit, Semiconductors and Semimetals 5, (Academic Press Inc., New York, 1970) p. 194.
- [ 2 ] M.H. Weiler, Semiconductors and Semimetals, (Academic Press Inc., New York, 1981) p. 176.
- [ 3 ] M. Yoshikawa, K. Maruyama, T. Saito, T. Maekawa and H. Takigawa, J. Vac. Sci. Technol., A5 32 (1989) 3052.
- [ 4 ] H. Takigawa, M. Yoshikawa and T. Maekawa, J. Crystal Growth 86 (1986) 446.
- [ 5 ] T. Yamamoto, Y. Mitamoto and K. Tanikawa, J. Crystal Growth 72 (1985) 270.
- [ 6 ] S.L. Bell and S. Sen, J. Vac. Sci. Technol. A3 (1985) 112.
- [ 7 ] K. Guergouri, R. Triboulet, A. Tromson-Carli and Y. Marfaing, J. Crystal Growth 86 (1988) 61.
- [ 8 ] W.M. Higgins, G.N. Pultz, R.G. Roy, R.A. Lancaster and J.L. Schmit, J. Vac. Sci. Technol. A7(2) (1989) 271.
- [ 9 ] A. Sher, A.B. Chen, W.E. Spicer and C.K. Shin, J. Vac. Sci. Technol. A3(1) (1985) 105.
- [ 10 ] S.M. Johnson, S. Sen, W.H. Konkel and M.H. Kalisher, J. Vac. Sci. Technol. B9(3) (1991) 1897.

- [11] J.C. Wooley and B. Lay, *J. Phys. Chem. Solids* 13 (1960) 151.
- [12] A. Tanaka, Y. Masa, S. Seto and T. Kawasaki, *J. Crystal Growth* 94 (1989) 166.
- [13] B.D. Cullity, *Element of X-ray diffraction*, (Addison-Wesley, 1985) p. 363.
- [14] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, 9ed (1993) p. 360.