

## Estudio de películas delgadas de Sn-Sb-Te mediante técnicas de análisis superficial, hiperfinas y métodos de primeros principios. Estructura, composición química y el rol de la oxidación

- Vitaliy Bilovol,<sup>1</sup> Hugo Medina Chanduví,<sup>2</sup> Arles Gil Rebaza,<sup>2</sup> Azucena Mudarra Navarro,<sup>2</sup> Leonardo Errico<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Laboratorio de Sólidos Amorfos, Facultad de Ingeniería - Universidad de Buenos Aires

<sup>2</sup>Instituto de Física, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Nacional de La Plata

<sup>3</sup>Universidad Nacional del Noroeste Bonaerense

<sup>4</sup>Instituto de Física de La Plata, Dpto. de Física, FCE - UNLP

Los materiales basados en calcogenidos presentan un gran interés tecnológico, sobre todo cuando sus dimensiones se reducen a películas. Ejemplo de estas aplicaciones son las llamadas memorias basadas en el fenómeno de cambio de fase reversible de alta frecuencia (PCM). Por este motivo, en los últimos años se han llevado a cabo muchos estudios de este tipo de películas a fin de predecir sus propiedades o tener control sobre las mismas.

Dentro del conjunto de materiales con potencial aplicación en PCMs, el sistema  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  (GST) ha concentrado buena parte del interés científico. Las películas delgadas de GST presentan una fase cúbica metaestable intermedia desde la cual se produce la transición reversible de alta frecuencia amorfo-cristalino, que es la transición de interés en el caso de PCMs. En este proceso, la temperatura de cristalización,  $T_C$ , juega un rol crítico. La  $T_C$  puede alterarse con el agregado de impurezas como O, N, o C y el funcionamiento de los dispositivos puede verse afectado por la presencia de estas impurezas, sobre todo O, y es sabido que las películas de GST expuestas a la atmósfera sin protección presentan procesos de oxidación y una  $T_C$  menor.

En forma similar al GST, el sistema Sn-Te-Sb (SST) presenta una fase cúbica metaestable cuando se produce la transición amorfo-cristalino y una  $T_C$  adecuada para su aplicación en dispositivos PCM. Por esto, el SST ha recibido una creciente atención. Sin embargo, aún quedan muchas cuestiones abiertas y para dilucidar las propiedades de las películas de SST, la comprensión detallada de su composición química y su estructura es de fundamental importancia.

En esta comunicación presentamos un estudio teórico-experimental de películas delgadas de Sn-Sb-Te con composición nominal  $\text{SnSb}_2\text{Te}_4$  obtenidas por deposición láser pulsada sobre un sustrato de mylar. Experimentalmente, las películas se estudiaron mediante espectroscopía Mössbauer (EM) con la sonda  $^{119}\text{Sn}$ , XPS y difracción de rayos X rasantes (GIXRD). GIXRD muestra que las películas obtenidas adoptan la estructura cúbica tipo Na-Cl (Fm-3m), sin la presencia (en los límites de detección) de otras fases.  $^{119}\text{Sn}$ -EM revela la presencia de dos especies de Sn: Sn(II), como se espera para la fase  $\text{SnSb}_2\text{Te}_4$ , y Sb(IV), lo que sugiere oxidación del Sn. Los resultados XPS indican la oxidación de Sn, Sb y Te en la superficie y la progresiva eliminación de los óxidos Sn-O y Sb-O en función de la profundidad en la película. Los perfiles de concentración en profundidad muestran un fuerte déficit de Te en las muestras. Desde el punto de vista teórico, cálculos basados en la teoría de la densidad funcional soportan la hipótesis que el Sn se localiza en la subred de Sb y que se forman vacancias de Sb y Te. A partir de la comparación entre los resultados de  $^{119}\text{Sn}$ -EM para el corrimiento isomérico y los obtenidos teóricamente es posible confirmar que los sitios de vacancia de Te son ocupados por átomos de oxígeno durante el proceso de oxidación de la película de Sn-Sb-Te, dando soporte a la hipótesis que la fracción de Sn(II) corresponde a Sn en sitios Sb que tienen (al menos) un oxígeno como primer vecino. Finalmente, nuestros resultados teóricos muestran que la presencia de oxígeno en los sitios de vacancia de Te vuelven al sistema Sn-Sb-Te semiconductor (gap del orden de 0.3 eV).