

171 Caracterización de estados de oxidación en películas ultradelgadas de circonio producidas mediante evaporación por haz de electrones

R. Villarroel¹, V. Fuenzalida¹

¹ Facultad de de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile.
rvb006@gmail.com

Los estados estables e inestables de oxidación del circonio han sido objeto de una considerable cantidad de estudios durante los últimos años. Existen desacuerdos en el origen, cantidad y estados intermedios de oxidación. Es posible verificar en la literatura la existencia de hasta tres especies de “sub-óxidos” relacionados directamente con sus estados de valencia Zr^{+n} , siendo estos referenciados como $n=1, 2$ y 3 . El estado metálico del circonio Zr^0 corresponde a $n=0$ y el estado oxidado estable ZrO_2 a $n=4$. Diversos estudios de cinética de oxidación en ultra alto vacío a bajas presiones de oxígeno han relacionado el crecimiento de estas subespecies no estequiométricas con Zr_2O , ZrO y Zr_2O_3 , respectivamente $n=1, 2$ y 3 [1], [2].

En el presente trabajo, realizado en el Departamento de Física de la FCFM, se estudian los estados tempranos de oxidación de películas ultradelgadas de óxido de circonio depositadas mediante la técnica de evaporación por haz de electrones en ultra alto vacío (UHV) sobre substratos de silicio monocristalino, usando como fuente ZrO nominal (Balzers 99.3%). Las muestras fueron caracterizadas mediante espectroscopia de fotoelectrones inducidos por rayos X (XPS) tanto recién preparadas (mantenidas en UHV) como después del contacto con el ambiente.

El ajuste de curvas a la señal $Zr3d$ (Fig. 1) del espectro XPS permitió descomponerla en distintas contribuciones. Dos de éstas (“ Zr^{+a} ” y “ Zr^{+b} ”), al ser comparadas con la literatura (Tabla I), se pueden asimilar a sub-óxidos de energías de ligadura entre 179 y 185 eV. Dichas señales se presentan solo cuando la muestra se ha mantenido en ultra alto vacío (Z1) y se pierden al contacto con el aire (Z1-Aire).

Al aumentar la corriente de evaporación en un 50% (Z2) se pierde la contribución atribuida a la energía de ligadura más cercana a Zr^0 , esto puede relacionarse con que el material de la fuente de evaporación puede cambiar su composición en función de la temperatura.

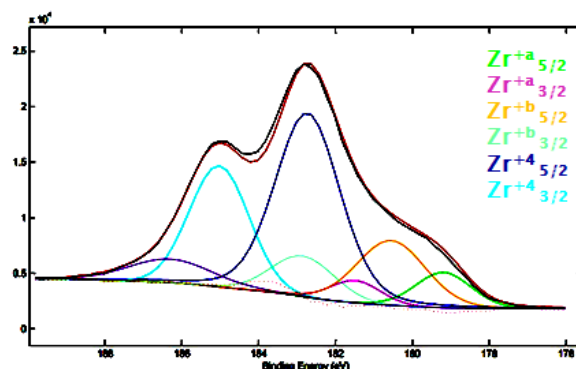


Fig. 1, Espectro de la energía de ligadura referente a la señal doblete $Zr3d$ característico del circonio.

Muestra	Z1	Z2	Z1-Aire	Ref.[3]	Ref.[4]
	$Zr_{3d/2}$ (eV)	$Zr_{3d/2}$ (eV)	$Zr_{3d/2}$ (eV)	$Zr_{3d/2}$ (eV)	$Zr_{3d/2}$ (eV)
Zr^{+a}	179.3	-	-	179.7	179.7
Zr^{+b}	180.6	180.9	-	181.2	180.7
Zr^{+4}	182.7	182.8	182.7	183.1	182.9

Tabla I. Energías de ligadura en la banda $Zr3d$, comparadas con referencias [3] y [4].

Referencias.

- [1] Y. Nishino et al, J. Nucl. Mater. **228**, 346 (1996).
- [2] C. Morant et al, Surface Science **218**, 331 (1989).
- [3] G. Bakradze et al. Journal of Applied Physics **110**. 024904 (2001).
- [4] C.O. de González et al. Surface Science **193**, 305 (1988).