

CdZnTe 晶体中位错分布特性研究

顾惠明 杨建荣 陈新强 何 力

(中国科学院上海技术物理研究所半导体薄膜材料中心及红外物理国家重点实验室 上海 200083)

摘要 用 Everson 腐蚀剂对 CdZnTe 材料的位错进行了腐蚀显示和观察,并对产生的腐蚀坑密度 (EPD) 进行了统计分析,结果发现在同一样品表面不同位置上或同一晶锭中不同区域内的位错密度分布都满足修正的瑞利分布.根据这一分布规律,从理论上得到了如何正确计算 CdZnTe 材料 EPD 值的抽样检查方法,并就这一分布规律对材料性能及其探测器光敏元大小选取的影响进行了讨论

PACC: 6710J, 7220, 7280E, 0785

1 前言

CdZnTe 材料主要被用作高性能 HgCdTe 外延的衬底,同时也是制备高能 X、 γ 射线探测器和高性能太阳能电池的重要材料^[1].作为衬底材料, CdZnTe 中的位错在生长过程中会延伸到外延材料中,而外延材料中的位错将直接影响光电二极管器件的性能^[1];作为高能射线探测材料和太阳能电池材料,位错会影响到材料的本征阻抗特性,进而影响到器件的性能.由此可见:位错密度是影响器件性能的重要因素,是评价 CdZnTe 材料的一个重要参数.

用腐蚀法来显示和评价晶体中存在的位错是一种常用的位错评价方法,它具有简单、直观等优点,腐蚀坑密度 (Etch Pit Density, EPD) 参数被普遍用作表征材料位错密度的指标.用来显示 CdZnTe 材料位错的腐蚀方法有多种,其中以 1995 年 Everson 等人^[2]提出的腐蚀方法最为有效,显示的信息最为丰富,并且对 HgCdTe 外延中常用的 (111)B 和 (211)B 晶面均有效.

从已有的报道来看,研究结果仅局限于给出材料的 EPD 值,而对 EPD 的分布特性则缺少研究,对材料 EPD 的实际分布状况并不清楚,然而,在实际应用中,了解 EPD 的分布具有重要的现实意义.从 CdZnTe 用作 HgCdTe 外延衬底应用角度来说,它对于正确评价位错密度、准确了解衬底与外延材料位错密度的对应关系是十分重要的;从 CdZnTe 用作高能射线探测器应用角度来说,目前人们已经制成 CdZnTe 平面阵列高能射线探测器,探测单元尺寸一般在几十微米到几百微米的范围之内,准确了解位错在材料中的分布有助于分析和认识

顾惠明 男, 1974 年出生, 硕士研究生, 专业: 半导体物理及器件

杨建荣 男, 1958 年出生, 研究员, 目前从事 HgCdTe 液相外延及其材料性能评价的研究

陈新强 男, 1948 年出生, 高工, 目前从事 HgCdTe 液相外延及热处理研究

1998-07-28 收到, 1998-11-14 定稿

由位错分布引起的各探测单元的性能起伏或由于位错密度过高而引起的探测器失效的机理

本文采用 Everson 腐蚀方法系统地对 CdZnTe 材料的位错腐蚀坑进行了观察和研究, 得到了同一样品表面不同位置和同一锭条中不同区域的位错密度分布情况, 根据分布图得出了位错密度在 CdZnTe 晶体中的经验分布规律, 给出了合理的 EPD 期望值抽样检测方法, 同时给出了某一面积范围内位错密度出现几率的计算公式, 文章也讨论了单元面积大小对位错密度分布的影响, 这种影响和探测器光敏元尺寸的合理选取直接相关

2 实验

本文采用的 CdZnTe 单晶样品是用垂直布里奇曼 (Vertical Bridgman) 方法生长的, 首先将晶锭切割成约 1mm 厚的晶片, 确定 A/B 面后, 对 B 面进行机械粗抛、精抛将其磨成镜面, 然后用 1% 溴甲醇对它进行 5s 的化学机械抛光, 接下来再用 1% 溴甲醇腐蚀 2min 以去除样品的表面损伤, 最后用 Everson 腐蚀液在室温下腐蚀 3min 以显示位错

样品腐蚀好以后, 用标准标尺校正后的光学显微镜在 500 倍下观察其 EPD 分布, 共分析了 3 组不同 CdZnTe 样品中的位错分布情况:

- 1、在 (111)B 晶面的同一晶片上, 对不同位置上的 EPD 值进行随机抽样, 共分析了 192 点的数据, 每点观测面积为 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ 。
- 2、对同一锭条中不同样品, 不同位置上 (211)B 晶面的样品进行随机抽样, 共分析了 71 点的 EPD 值, 每点观测面积为 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ 。
- 3、对同一锭条中不同样品, 不同位置上 (111)B 晶面的样品进行随机抽样, 共分析了 47 点的 EPD 值, 每点观测面积为 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ 。

3 结果和讨论

得到 EPD 数据后, 首先将三种情况下观察到的数据按大小分成间隔为 $5 \times 10^4 \text{cm}^{-2}$ 的数据组, 即将 EPD 值数据分为: $0 \sim 5 \times 10^4$, $5 \times 10^4 \sim 1.0 \times 10^5$, $1.0 \times 10^5 \sim 1.5 \times 10^5$, $1.5 \times 10^5 \sim 2.0 \times 10^5$ ……等数据组, 再对落于每组范围内的数据个数 n 进行统计, 并将 n 除以总的的数据个数, 再除以每组的位错密度的取样间隔就得到不同位错密度下的几率密度

将上面得到的几率密度值与 EPD 值的关系用直方图 1、2、3 来表示比较清楚、直观, 图中横坐标为位错密度 (EPD 值)、纵坐标为几率密度

仔细分析图中的数据可以发现, CdZnTe 中的 EPD 的分布服从某一固定的分布规律, 在统计学中类似形状的分布有: 泊松分布、瑞利分布、 χ^2 分布、 F 分布等几种, 其中瑞利分布表达最为简洁, 并且与实际值也符合得相对最好, 对它乘以一个 $5/6$ 的因子并归一化修正后得如下分布表达式, 这种分布最能代表实际的分布

$$P(x) = \begin{cases} 1.885x/\mu^2 \exp(-x^2/1.061\mu^2) & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (1)$$

其中 x 为 EPD 值; μ 为 x 的均值, 该分布的方差为: $D(x) = (4/\pi - 1)\mu^2$

上面表达式是在 EPD 的观察面积为 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ 的情况下得出的, 但在实际中观察

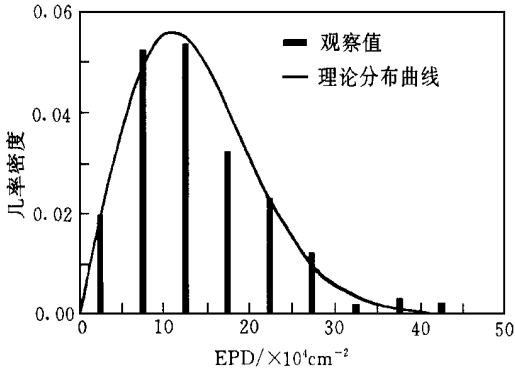


图 1 抽样 1, 同一表面上 EPD 的统计分布及其理论分布曲线((111) 晶面)

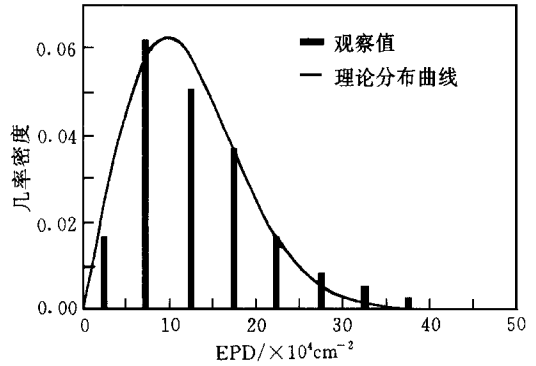


图 2 抽样 2, 同一锭条中 EPD 的分布及其理论分布曲线((211) 晶面)

面积不一定是 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$, 观察面积的不同会造成分布的变化, 因此还需要考虑面积因素, 统计分析后发现, 面积因素可以用 $\sqrt{s/s_0}$ 这个因子来修正, 修正后表达式(1)变为:

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1.885x}{\mu^2} \sqrt{\frac{s}{s_0}} \exp\left(-\frac{x^2}{1.061\mu^2} \sqrt{\frac{s}{s_0}}\right) & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (2)$$

其中 s 为实际观测位错的面积, 单位为 m^2 , $s_0 = 100 \times 100 \mu\text{m}^2$.

将三组实验抽样的 EPD 均值作为变量 μ 代入经验公式(2), 即可得到一组 EPD 的统计分布曲线, 将这组分布曲线和实验结果比较(见图 1、2、3)可以发现, 在上述三种不同的情况下, 实验值与理论曲线都符合得较好, 因此, 可以认为 EPD 在 CdZnTe 中的分布是基本符合修正后的瑞利分布规律的

仔细分析分布函数(2)还可以发现, 对于某一固定的观测面积, 只要得出位错密度的平均值 μ , 就可以利用此函数得到 CdZnTe 表面位错密度的分布情况, 这样就可以用 EPD 的平均值来表征 CdZnTe 中的 EPD 分布

在统计学中, 平均值可采用抽样检验的方法获得, 即随机抽样 N 点的 EPD 值, 取平均即可. 其中 N 如取值过大则工作量太大, 取值过小则所得的平均值离散性太大, 可信度不高. 为此, 我们进一步对函数(2)进行了统计学分析^[3], 得到了在观测面积为 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ 的情况下, N 的取值和由此求得的分布曲线的精度与可信度之间的关系见表 1. 表中参数的意义为: 通过对 EPD 作 N 次随机测量, 真实的 EPD 平均值落于实测平均值的精度范围内的可能性至少有 $1 - \alpha$ 那么大

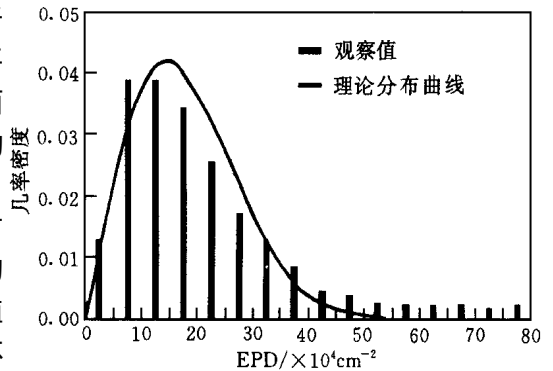


图 3 抽样 3, 位错密度在同一锭条中的分布及其理论分布曲线((111) 晶面)

表 1 随机抽样数 N 的取值(观测面积 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$)

可信度	精度		
	$\pm 50\%$	$\pm 20\%$	$\pm 10\%$
$(1 - \alpha) = 0.90$	2	12	46
$(1 - \alpha) = 0.95$	3	17	67
$(1 - \alpha) = 0.99$	5	29	115

在对 CdZnTe 的 EPD 进行测量时, 考虑到腐蚀条件、观察标准而引入的误差和实际应用中 EPD 值控制的要求, 我们认为一般取 $(1 - \alpha) = 0.90$ 的可信度和 $\pm 20\%$ 的精度比较合适, 即随机观测 12 点以上得到的 EPD 平均值即可较为准确的反映出 CdZnTe 材料位错性能这一重要的质量指标

进一步分析公式(2), 将它从 X_0 到 X_1 积分可以得到下面的公式:

$$P(X_0 \sim X_1) = \exp\left[-\frac{X_0^2}{1.061\mu^2} \sqrt{\frac{s}{s_0}}\right] - \exp\left[-\frac{X_1^2}{1.061\mu^2} \sqrt{\frac{s}{s_0}}\right] \quad (3)$$

这个公式可用于计算位错密度落于 X_0 到 X_1 范围内的几率 这对器件分析有重要意义, 它可以用于分析探测单元上位错密度落于某一范围内的可能性, 进而可以分析可能由位错密度起伏引起的器件性能的起伏

分析分布公式(2)还可以发现, 面积 s 越小, 位错密度的分布曲线越趋于平坦, 也就是说随着面积的减小出现高位错密度和低位错密度的可能性都增加 根据这个道理, 在器件工艺中, 随着器件探测单元面积的减小出现高位错密度的可能性就增大, 也就是产生低性能或失效的探测单元的可能性也增大, 这个因素在器件小型化过程中应该考虑到

4 结论

在对不同情况下 CdZnTe 材料中位错腐蚀坑密度(EPD)进行观察和分析后发现, CdZnTe 材料的 EPD 具有修正的瑞利分布的特性, 用这种修正的瑞利分布来表征 CdZnTe 中的 EPD 才能最为客观地反映 CdZnTe 材料中位错的实际状况 修正的瑞利分布可以用 EPD 的平均值来表征, 运用数理统计分析方法对不同精度、可信度要求下 EPD 平均值的测量要求进行分析后发现: 随机观测 12 点以上得到的 EPD 平均值即可较为准确的反映出 CdZnTe 材料位错情况 对位错的分布特性分析后还发现: 小的光敏元上位错密度的起伏较大, 高位错密度的探测单元较多, 容易造成较多的低性能探测单元 研究结果加深了对 CdZnTe 材料的位错分布特性的认识, 并为正确评价 CdZnTe 材料的位错情况以及探测器光敏元的合理选取提供了科学的依据

参 考 文 献

- [1] Peter Capper, Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds U.K., GEC-Marconi Infra-Red Limited, 1993, p369~370
- [2] W. J. Everson, C. K. ARD, J. L. Sepich *et al.*, J. Electronic Materials, 1995, 24(5): 505~510
- [3] 王福保等, 概率论及数理统计, 上海: 同济大学出版社, 1984, 第九章: 假设检验

D istribution Behavior of D islocation in CdZnTe Materials

Gu Huiming, Yang Jianrong, Chen Xinqiang, He Li

*(Epitaxy Research Center for Advanced Material and National Laboratory for Infrared Physics,
Shanghai Institute of Technical Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)*

Received 28 July 1998, revised manuscript received 14 November 1998

Abstract The dislocations in CdZnTe are revealed and analyzed by using Everson etchant. The distributions of Etch Pit Density (EPD) on sample surfaces and at different locations in an ingot are obtained. It is found that the distributions of EPD in both cases are subject to a modified Rayleigh distribution. Using mathematical statistics, a screening method at CdZnTe substrate is established. The influences of EPD distribution on the device performance as well as on the sizes of the pixel in a detector are discussed.

PACC: 6710J, 7220, 7280E, 0785