

液相外延 HgCdTe 薄膜组分均匀性 对红外透射光谱的影响*

王庆学 魏彦锋 杨建荣 何力

(中国科学院上海技术物理研究所 半导体材料与器件研究中心, 上海 200083)

摘要: 用多层模型和膜系传递矩阵计算了 HgCdTe/CdZnTe 外延薄膜的红外透射光谱, 结果表明组分扩散区主要影响透射光谱的干涉条纹和透射率小于 10% 的区域, 而组分梯度区则影响吸收边斜率. 横向组分波动也将影响透射光谱的吸收边斜率, 当组分均方差小于 0.005 时, 横向组分波动对透射光谱影响可以忽略. 用新的组分分布模型计算了 HgCdTe/CdZnTe 液相外延薄膜的理论透射光谱, 并运用非线性二乘法使理论曲线能够很好地与实验结果吻合, 从而获得了更加可信的 HgCdTe 外延薄膜的纵向组分分布和厚度参数.

关键词: 多层模型; 膜系传递矩阵; HgCdTe 外延薄膜; 纵向组分分布; 横向组分波动

PACC: 5270K; 7280E; 7360F

中图分类号: TN04 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2005)05-0904-06

1 引言

HgCdTe 外延薄膜是发展高性能红外焦平面器件的基础, 材料组分均匀性是评价 HgCdTe 外延薄膜特性的基本参数^[1]. 由于材料本身和工艺因素等原因, HgCdTe 外延薄膜存在横向组分波动和纵向组分梯度, 横向组分波动将影响光敏元的均匀性, 而纵向组分梯度将导致外延薄膜存在内建电场. 研究发现适当的组分梯度有利于少数载流子向结区扩散, 然而过大的组分梯度将影响探测器的截至波长、稳定性、噪声以及探测率等^[2]. 因此, 采用适当的测量方法评价 HgCdTe 外延薄膜的组分均匀性, 对 HgCdTe 外延薄膜的生长及 HgCdTe 探测器的制备都具有重要的意义. 目前, HgCdTe 外延薄膜组分的测量方法主要有红外透射光谱、SIMS、EDS 及光反射等^[3], 其中红外透射光谱由于具有非接触、非破坏性等特点, 已成为 HgCdTe 外延薄膜常规的测试和评价手段. Hougén 和 Rosenfeld 均建立了各自的 HgCdTe 液相外延薄膜组分分布模型, 通过拟合红外透射谱给出了该材料纵向组分分布; 刘坤在拟合

HgCdTe 外延薄膜红外透射谱时考虑了横向组分波动的影响, 然而他们仅拟合了红外透射谱的本征吸收边, 忽略了薄膜的干涉效应^[4,5]. 我们在研究中发现, 如果考虑薄膜干涉效应, 采用 Hougén 和 Rosenfeld 的组分分布模型均并不能很好地拟合实验结果. 因此, 本文对现有组分分布模型进行了修正, 并采用多层模型和膜系传递矩阵计算了 HgCdTe 外延薄膜的理论透射光谱, 从理论上研究了组分梯度和组分横向波动对透射光谱的影响, 最后用新建立的组分分布模型拟合了具有 HgCdTe/CdZnTe 结构的红外透射光谱, 并获得了 HgCdTe 液相外延薄膜的纵向组分分布.

2 理论模型

对于具有组分梯度的 HgCdTe 薄膜, 采用多层模型计算红外透射光谱, 假定每层具有相同的组分和光学常数. 对于 m 层的膜系, 由多层模型和膜系传递矩阵理论可以得到^[6],

$$\begin{bmatrix} E_{0,t}^+ \\ E_{0,r}^- \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E_{m+1/2,t}^+ \\ E_{m+1/2,r}^- \end{bmatrix} \quad (1)$$

*国家自然科学基金委创新研究群体科学基金资助项目(批准号:60221502)

王庆学 男, 1977 年出生, 博士研究生, 主要从事 HgCdTe 半导体材料的表征.

2004-06-01 收到, 2004-08-11 定稿

其中 $E_{0,t}^+$ 和 $E_{0,t}^-$ 分别为在入射介质中平行于界面的入射和反射电磁场矢量； $E_{m+1/m,t}^+$ 和 $E_{m+1/m,t}^-$ 分别为出射介质中平行于界面的出射和反射电磁场矢量； M 为膜系传递矩阵，

$$M = \left[\begin{matrix} m \\ k=1 \end{matrix} V_{k-1}^{-1} V_k U_k \right] V_m^{-1} V_{m+1} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (2)$$

V_k 为导纳矩阵，表达式为：

$$V_k = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{bmatrix} \quad (3)$$

V_k^{-1} 为 V_k 的逆矩阵，为光学导纳。

对于 P 偏振

$$P = \frac{N}{\cos \theta} \quad (4)$$

式中 θ 为入射角； N 为复数折射率，

$$N = n - jk \quad (5)$$

式中 n 为折射率； k 为消光系数。

对于 S 偏振，

$$s = N \cos \theta \quad (6)$$

U_k 为位相矩阵，

$$U_k = \begin{bmatrix} \exp(jk) & 0 \\ 0 & \exp(-jk) \end{bmatrix} \quad (7)$$

其中 δ 为光程差，它与折射率和厚度的关系为，

$$\delta = \frac{2 N d \cos \theta}{\lambda} \quad (8)$$

由 (1) ~ (8) 式可以求出多层膜总的反射率 (适用于 P 和 S 偏振)，

$$R_{S,P} = \left| \frac{E_{0,t}^-}{E_{0,t}^+} \right|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 \quad (9)$$

对于 P 偏振，多层膜总的透射率为：

$$T_P = \left[\frac{N_{m+1} \cos \theta_0}{N_0 \cos \theta_{m+1}} \right] \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \quad (10)$$

θ_0 和 θ_{m+1} 分别为入射角和出射角。而对于 S 偏振，多层膜总的透射率为，

$$T_S = \left[\frac{N_{m+1} \cos \theta_{m+1}}{N_0 \cos \theta_0} \right] \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \quad (11)$$

因此，对于非偏振光，总的透射率则为：

$$T = \frac{1}{2} (T_P + T_S) \quad (12)$$

总的反射率为：

$$R = \frac{1}{2} (R_P + R_S) \quad (13)$$

对于 HgCdTe/CdZnTe 结构的 HgCdTe 外延薄膜，衬底 CdZnTe 的厚度一般约为 1mm 左右，该

厚度远大于光源的相干长度，且禁带宽度大于红外光谱仪测试波段的光子能量，因此，光在衬底中的传播只需要考虑光波强度的叠加。图 1 为光通过外延薄膜时的光传播示意图。所以，光通过外延层和衬底后总的透射率为，

$$T_{total} = \frac{T_a^+ (1 - H) T_b^+}{1 - R_a^- R_b^+ (1 - H)} \quad (14)$$

T_a^+ 和 R_a^- 可以运用 (1) ~ (13) 式计算， T_b^+ 和 R_b^+ 可以由衬底的折射率求出， H 为外延层表面光波的散射损失。

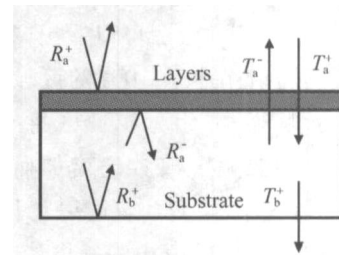


图 1 光通过外延薄膜时的传播示意图

Fig. 1 Schematic diagram of light transmission in epilayer film

3 理论计算结果与讨论

3.1 纵向组分梯度

Hougen 和 Rosenfeld 均给出了 HgCdTe 外延薄膜的组分分布模型^[2,4]，然而如果考虑薄膜的干涉效应，运用这两个组分梯度模型拟合红外透射光谱时，均不能与实验结果很好地匹配。研究发现，Rosenfeld 组分分布模型不能很好地拟合红外光谱的原因在于该模型所给出的组分扩散区具有太大的组分梯度。为更好地拟合红外光谱而获得更加准确的 HgCdTe 外延薄膜的组分分布，我们在 Rosenfeld 的组分分布模型的基础上，对该模型进行了修正 (减小了扩散区的组分梯度)，给出了新的组分分布模型，

$$x(z) = x_s + s(d - z) + (1 - x_s - sd) (1 - \operatorname{erf}(\frac{2z}{z}))^3 \quad (15)$$

式中 $x(z)$ 为距界面为 z 处的组分； x_s 、 d 、 s 和 z 分别为外延层的表面组分、厚度、组分梯度以及扩散区的厚度。由于组分扩散通常能够用误差函数很好地描述，因此该模型中的组分扩散区也表示为与误差函数有关的参量。

HgCdTe 外延薄膜的组分扩散区和组分梯度区由于具有不同的组分梯度,因而对红外透射光谱产生不同的影响.图 2 为 HgCdTe/CdZnTe 外延薄膜组分扩散区厚度对透射光谱的影响.图 2(a)为具有不同的组分扩散区厚度的纵向组分梯度,其他参数分别为 $s = 0, d = 15\mu\text{m}, x_s = 0.215$.图 2(b)为分别对应于图 2(a)中的组分梯度,运用上述的多层模型和膜系传递矩阵计算的理论透射光谱,入射角度为 0 的正入射. HgCdTe 的折射率和吸收系数分别与组分和波长的关系取自文献[3].消光系数可以由吸收系数($k = \alpha/4$)求出.由图可以看出,扩散区主要影响干涉条纹和透射率小于 10% 的区域,对透射光谱的其他部分影响很小.组分扩散区将导致红外透射光谱干涉条纹的振幅随波数的增加而梯度减小,并且组分扩散区的厚度越大,该透射光谱干涉条纹的振幅随波数增加而梯度减小的幅度增加.同时,组分扩散区厚度的增加也使透射光谱尾部的斜率减小.

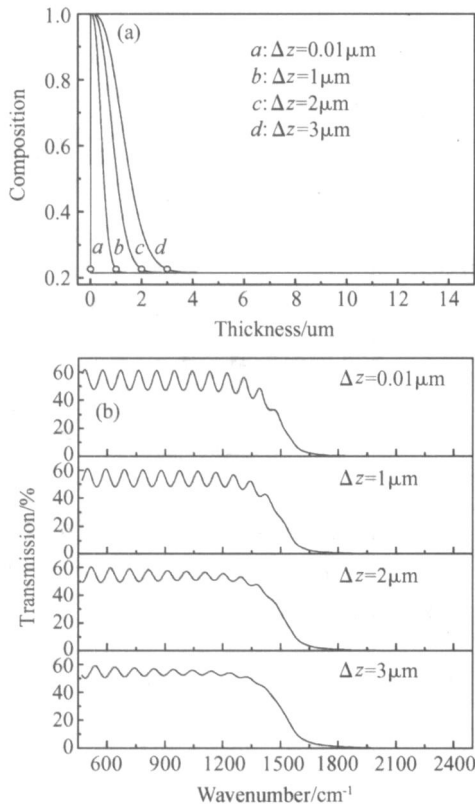


图 2 组分扩散区对红外透射光谱的影响

Fig.2 Effect of compositional diffusion width on infrared transmission spectroscopy

图 3 为不同外延层的组分梯度对透射光谱的影响.图 3(a)是具有不同组分梯度的 HgCdTe/

CdZnTe 外延薄膜的纵向组分分布,其他的参数分别为 $z = 0, d = 15\mu\text{m}, x_s = 0.215$.图 3(b)是分别与图 3(a)所对应的理论透射光谱.可以看出,组分梯度主要影响透射光谱的吸收边,对干涉条纹几乎没有影响.随组分梯度的增加,透射光谱的吸收边向高波数移动,并且透射光谱的吸收边的斜率减小.

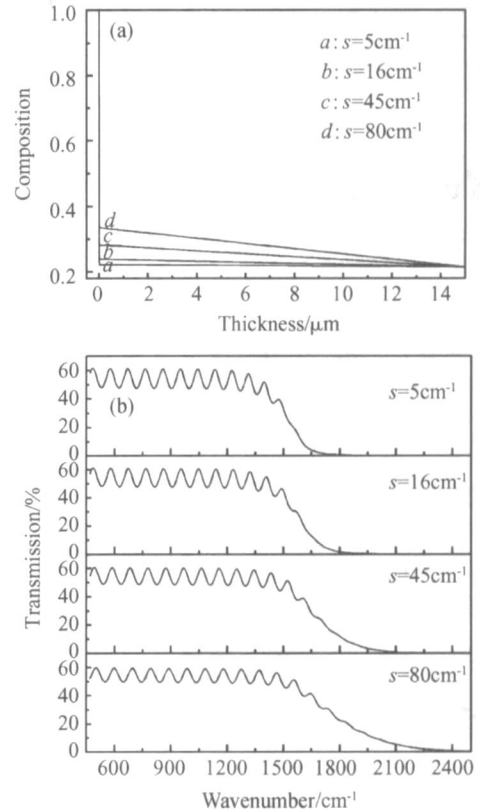


图 3 组分梯度区对红外透射光谱的影响

Fig.3 Effect of compositional gradients on infrared transmission spectroscopy

3.2 横向组分波动

刘坤等人证实 HgCdTe 体材料和外延薄膜的横向组分波动均符合正态分布^[5],即:

$$f(x) = (1/\sqrt{2\sigma^2}) \exp(-(x - \mu)^2/2\sigma^2) \quad (16)$$

其中 μ 为组分平均值; σ^2 为反映组分离散性的均方差.具有横向组分波动的 HgCdTe 材料的吸收系数为,

$$\text{average} = \int_{x-2}^{x+2} (x) f(x) dx \quad (17)$$

其中 (x) 是组分为 x 的 HgCdTe 材料的吸收系数.运用上述的理论模型所计算的具有不同横向组分均方差的理论红外透射光谱见图 4.理论计算时,该外延薄膜的纵向组分分布的各个参数分别为 $s = 16\text{cm}^{-1}, z = 2.0\mu\text{m}, d = 15\mu\text{m}$ 和 $x_s = 0.215$.从图

4 可以看出,横向组分波动将影响透射光谱的吸收边,组分均方差越大,则透射光谱吸收边的斜率越小.同时,也可以看到,组分均方差小于 0.005 时,横向组分波动对透射光谱的影响很小,一般 HgCdTe 外延薄膜的组分均方差均小于 0.002,所以在运用透射光谱(3mm 大光斑)拟合 HgCdTe 组分纵向分布时,不需要考虑横向组分对透射光谱的影响.横向组分波动对透射光谱的影响是由于横向组分波动直接影响吸收系数所致,如图 5 所示.可以看出组分波动对吸收系数的影响和对透射光谱的影响相同,组分均方差越大则吸收系数偏离越大,但是当组分均方差小于 0.005 时,组分偏离对吸收系数的影响已经很小,图 5 中给出了具有小的组分偏离时,其吸收系数与波数之间的关系曲线已经重合.

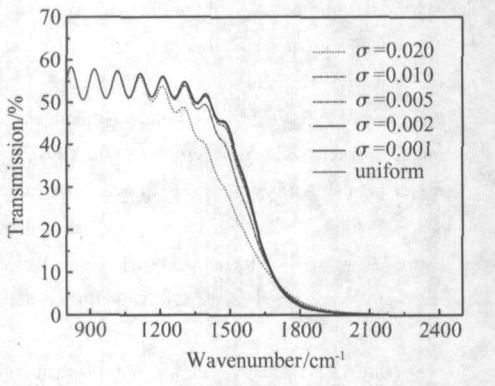


图 4 横向组分波动对红外透射光谱的影响

Fig. 4 Effect of transverse composition non-uniformity on infrared transmission spectroscopy

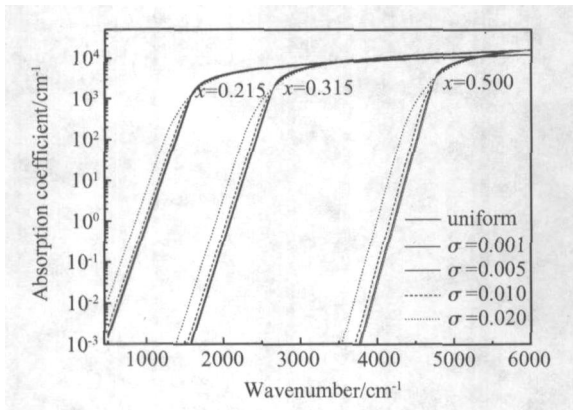


图 5 横向组分波动对吸收系数的影响

Fig. 5 Effect of transverse composition non-uniformity on absorption coefficient

运用多层模型计算的理论透射率曲线及分析表明,扩散区 z 主要影响干涉条纹和透射率小于 10% 的区域,而组分梯度 s 将直接影响透射光谱的

吸收边斜率,通过透射光谱的形状可以定性地判断 HgCdTe 外延薄膜的纵向组分梯度;横向组分波动也将影响透射光谱的吸收边斜率,对于组分均方差小于 0.005 时,横向组分波动对透射光谱影响很小,对于一般的 HgCdTe (< 0.002) 外延薄膜,在拟合红外光谱时不需要考虑横向组分波动的影响.

4 实验结果与理论拟合

实验所用的 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 样品是由水平推舟式液相外延工艺生长,Cd 组分控制在 $x = 0.22 \sim 0.23$,薄膜的厚度为 $10 \sim 15\mu m$,生长温度约为 $460^\circ C$,衬底为 [111] 取向的 CdZnTe 衬底,Zn 组分约为 4%. 红外透射光谱用 Nuxus 670 傅里叶红外光谱仪测量,测量范围为 $400 \sim 4000cm^{-1}$,入射几何为正入射.

图 6 中的空心原点为 HgCdTe 样品的室温透射光谱,可见吸收边陡峭,最大透射率高达 60%,并且有明显的干涉条纹,说明该样品具有平滑的界面和表面.图 6 同时也给出了运用上述的多层模型以及非线性二乘法(Marquadt 算法)与实验曲线最佳

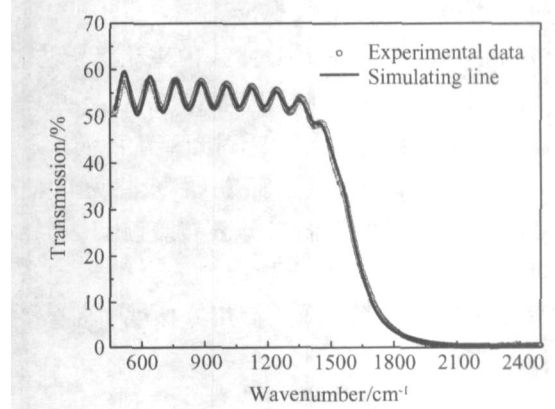


图 6 LPES428 红外透射光谱及理论拟合曲线

Fig. 6 Transmission spectra of LPES428 and theoretical fitting line

匹配的理论透射率曲线.可以看出,理论拟合与实验结果吻合得很好,说明该多层模型的正确性和可行性.图 7 给出了透射光谱最佳拟合时的纵向组分分布及最佳的拟合参数, H 为光波在外延层表面的散射损失,一般该参数在 6% 左右.外延薄膜的纵向组分分布分为明显的两个区域:组分扩散区和组分梯度区.组分扩散区在 $2\mu m$ 左右,这与所 Yoshikawa 报道的结果相近^[7],在组分梯度区,该样品的组分梯

度很小. 另外, 运用多层模型和非线性二乘法编制的软件可以自动拟合 HgCdTe 外延薄膜的透射光谱, 来获得该外延薄膜的纵向组分梯度和厚度等参数, 从而使红外透射光谱成为获得 HgCdTe 外延薄膜组分分布的常规测试手段.

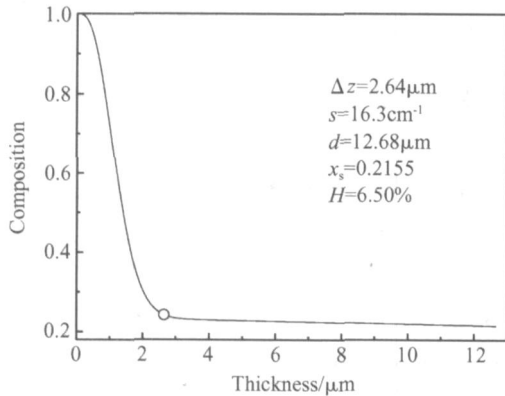


图 7 LPES428 的纵向组分分布

Fig. 7 Longitudinal composition profile of LPES428

5 结论

本文对 Rosenfeld 提出的 HgCdTe 外延薄膜组分纵向分布模型进行了修正, 采用多层模型和膜系传递矩阵法作为透射率光谱曲线的理论计算方法, 通过使用非线性二乘法, 从理论上完全再现了 HgCdTe 液相外延薄膜红外透射光谱干涉波形和吸收边的实验测量结果, 进而获得了最为可信的 HgCdTe 外延薄膜的纵向组分分布. 理论计算结果还表明, 扩散区 z 主要影响透射光谱的干涉条纹和透射率小于 10% 的区域, 而组分梯度 s 将直接影

响吸收边斜率; 横向组分波动也将影响透射光谱的吸收边斜率, 当组分均方差小于 0.005 时, 横向组分波动对透射光谱影响很小, 对于一般的 HgCdTe (< 0.002) 外延薄膜在拟合红外透射光谱时不需要考虑横向组分波动的影响.

参考文献

- [1] Li Biao, Chu Junhao, Zhu Jiqian, et al. Relationship between LPE growth condition and composition-in-depth profile of (Hg, Cd) Te epilim. Chinese Journal of Semiconductors, 1996, 17(10): 721 (in Chinese) [李标, 褚君浩, 朱基干, 等. (Hg, Cd) Te 薄膜的 LPE 生长条件与纵向组分分布. 半导体学报, 1996, 17(10): 721]
- [2] Rosenfeld D, Garrber V, Ariel V, et al. Compositionally graded HgCdTe photodiodes: prediction of spectral response from transmission spectrum and the impact of grading. Journal of Electronic Materials, 1995, 24(9): 1321
- [3] Price S L, Boyd P R. Overview of compositional measurement techniques for HgCdTe with emphasis on IR transmission, energy dispersive X-ray analysis and optical reflectance. Semicond Sci Technol, 1993, 8: 842
- [4] Hougén C A. Model for infrared absorption and transmission of liquid-phase epitaxy HgCdTe. J Appl Phys, 1989, 66(8): 3763
- [5] Liu Kun, Chu J H, Li Biao, et al. Measurement of composition in $Hg_{1-x}Cd_xTe$ epilayers. Appl Phys Lett, 1994, 64(21): 104
- [6] Lin Yongchang, Lu Weiqiang. Principle of optical films. Beijing: National Defense Industry Press, 1990 (in Chinese) [林永昌, 卢维强. 光学薄膜原理. 北京: 国防工业出版社, 1990]
- [7] Yoshikawa M. Dislocation in $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_{1-x}Zn_xTe$ epilayers grown by liquid-phase epitaxy. J Appl Phys, 1988, 63(5): 1533

Effect of LPE HgCdTe Composition Ununiformity on Infrared Transmission Spectra *

Wang Qingxue , Wei Yanfeng , Yang Jianrong , and He Li

(*Research Center for Advanced Materials and Devices, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China*)

Abstract : Theoretical infrared transmission spectra of HgCdTe/ CdZnTe epilayers are calculated by using multilayer model and transfer matrix. The results show that the interference peaks and the tail region of the transmission curves are mainly affected by compositional diffusion region and the cutoff slope depends on composition gradient. And it is found that transverse composition nonuniformity results in the decreasing of the cutoff slope of the transmission curves. If composition deviation in HgCdTe epilayers is less than 0.005, the influence of transverse composition nonuniformity on the transmission curves can be neglected. Then the theoretical infrared transmission spectra of LPE HgCdTe/ CdZnTe epilayers are calculated by using new composition profile. And the measured transmission spectra are fitted best by nonlinear least squares and the composition profile and thickness of HgCdTe epilayers is obtained.

Key words : multilayer model; transfer matrix; HgCdTe epilayers; longitudinal composition profile; transverse composition nonuniformity

PACC : 5270 K; 7280 E; 7360 F

Article ID : 0253-4177(2005)05-0904-06

* Project supported by Innovation Research Group Science Funds of National Natural Science Foundation of China(No. 60221502)

Wang Qingxue male, was born in 1977, PhD candidate. He is engaged in research on characterization of HgCdTe semiconductor materials.

Received 1 June 2004, revised manuscript received 11 August 2004

© 2005 Chinese Institute of Electronics