

用 DLTS 法研究高镉组份 碲镉汞的深能级

唐晓慧 张景韶 宋炳文
(昆明物理研究所)

摘要——用深能级瞬态谱(DLTS)研究用于制备 $1.3\sim1.55\mu\text{m}$ 光纤通信探测器的高镉碲镉汞($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, $x>0.5$)混晶的深能级。观察到了一个位于禁带中央的深能级以及几个在实验器件制备过程中引入的深能级。研究表明, 电容瞬态过程是非指数形式的。基于合金无序导致能级展宽, 对实验曲线作了拟合, 推导出禁带中央能级的展宽度。

一、引言

半导体禁带中的深缺陷能级对器件特性有很大的影响。碲镉汞混晶深能级的研究处于开始阶段^[1, 2], 而且集中在红外探测器应用的低镉组份范围。已观察到若干深能级, 并研究了它们对器件特性的影响^[3]。对高镉组份还未见报道。本文报道利用深能级瞬态谱方法(DLTS)研究高镉($x>0.5$)碲镉汞混晶深能级的初步结果。

二、实验

1. 深能级瞬态谱。

利用结电容瞬态过程研究深能级的 DLTS^[4]法具有灵敏度高、能同时测量深能级各个特征参数等优点。本文使用国产 NJM-DLTS 谱仪($t_1:t_2=1:2$)测量。考虑到所研究材料禁带宽度接近 0.8 eV , 温度扫描范围为 $77\sim300\text{ K}$ 。按通常程序处理得到的谱线, 从阿雷尼尔斯图得到深能级参数。计算中忽略了俘获截面随温度的变化。实验表明结电容瞬态偏离单一指数过程, 对此, 将从合金能级展宽的模型出发加以讨论。

2. 高镉碲镉汞材料特点

对窄禁带碲镉汞材料和器件已有大量的研究报道, 但对宽禁带即高镉组份材料的研究还不多, 如禁带宽度 E_g 与组份 x 的关系还缺乏完整的经过验证的表达式。我们仍采用从窄

本文 1987 年 1 月 7 日收到。修改稿 1987 年 3 月 17 日收到。

禁带范围推出的 $E_g(x, T)$ 表达式^[5]

$$E_g(x, T) = -0.302 + 1.93x + 5.35 \cdot 10^{-4}(1-2x)T - 0.810x^2 + 0.832x^3,$$

这样推算出的高镉组份碲镉汞的 E_g 值与参考文献^[6]相比差值在 30 meV 以内。

窄禁带碲镉汞的导带底呈非抛物线形，对高镉即宽禁带混晶，导带底可用抛物线近似^[7]。其电子有效质量 $m_e^* = 0.078 E_g m_0$ ^[8]，空穴有效质量 $m_h^* \approx 0.55 m_0$ 。

3. 实验用结型器件

晶锭用固态再结晶法生长，未定向。原生晶片一般是 P 型的，可直接或采用二次钝化处理后用作 P 型基底。采用汞饱和蒸气压在 300°C 左右热处理可得到 N 型基底材料^[9]。在基底上制作肖特基结或扩散 N-P 结作为实验用器件，按制作方法有五种：用表面镀金后经 300°C 扩散 15~20 min 的材料制作的 Ag/N-MCT 肖特基结、Al/N-MCT 肖特基结、表面经硼离子注入后的 Ag/N-MCT 结。P 型基底材料、In/P-MCT 肖特基结和汞热扩散法制备台面型 N-P 结。此外，还制备了 Au/N-CdTe 肖特基结。

每个实验器件经 DLTS 测量后，均在结近邻用扫描电镜作多点组份测定以得到该器件组份 x 值为 0.55~0.84，连同所测的 CdTe 深能级值，可分析深能级位置与 x 的关系。

三、实验结果

测得 5 种结的 DLTS 谱线有单峰和双峰两种类型。热扩散 N-P 结只有 1 个谱峰，如图 1。其余四种均有 2 个谱峰，图 2 为其中之一，把浅峰记为 E_1 ，深峰记为 E_2 。N-P 结的谱峰位置近于 E_2 ，所以也记为 E_2 。图 3 为根据谱线作出的 Arrhenius 图，由直线斜率不同可知它们对应于 5 个深能级。

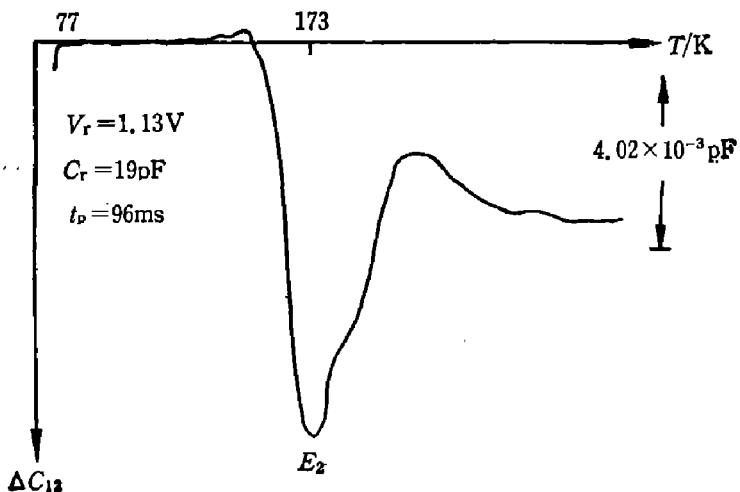


图 1 N-P 结 DLTS 谱峰

Fig. 1 DLTS peaks of N-P junction.

各深能级典型结果示如表 1。 E_1 和 E_2 与 x 值有关，结果见图 4。深能级可以表达为禁带宽度，即 x 的函数。为比较，图中同时给出 E_g-x 关系。

分析表明， E_1 和 E_2 均与 E_g 成线性关系，其中 E_2 对各种样品都是相同的， $E_2 = \frac{1}{2} E_g$ 。 E_1 与制作器件的工艺有关，对 Al/N-MCT， $E_1 = 0.13 E_g$ ；对表面 Au 扩散掺杂后形成的

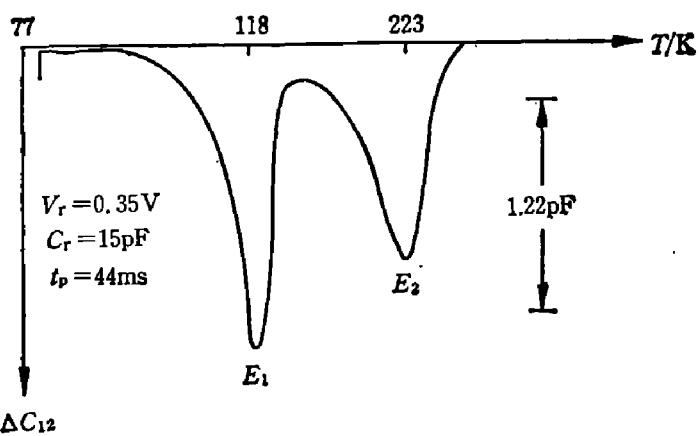


图 2 B 离子注入 Ag/N-MCT 肖特基结的 DLTS 谱图

Fig. 2 DLTS peaks of B^{+} -ion implanted
Ag/N-MCT SBD.

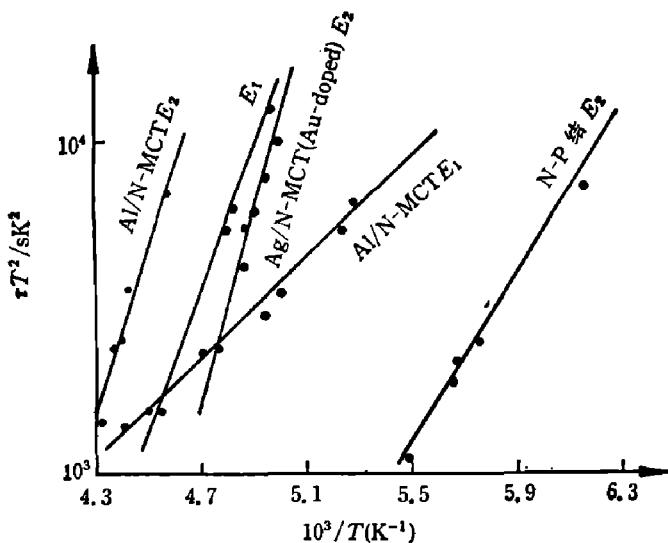


图 3 从 DLTS 谱线导出的阿雷尼尔斯图

Fig. 3 Arrhenius plots deduced from DLTS.

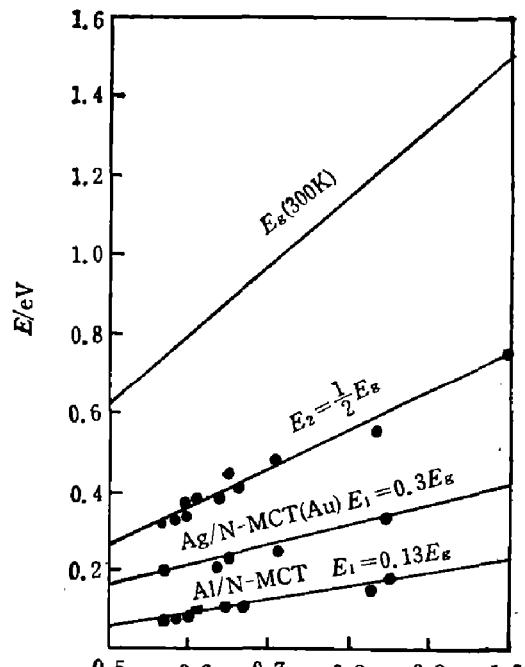


图 4 $E_T-x(E_g)$ 图

Fig. 4 Variation of E_T versus $x(E_g)$

表 I 各类器件典型深能级参数

Table 1 Typical deep level parameters of various devices.

编 号	器 件	x	E_g (eV, 300K)	E_T (eV)		$N_T/N_D(\%)$	$\sigma_n(cm^2)$
				E_c-E_1	E_c-E_2		
N-8051-4	Ag/N-MCT(Au)	0.635	0.767	0.21	0.39	1.1	$7.1E-18$
				0.09	0.37	0.5	$1E-15$
N-8501-7	Al/N-MCT	0.599	0.710	0.23	0.60	1.4	$1E-20$
				0.08	0.37	17	$3E-16$
II-3	Ag/N-MCT(B 注入)	0.76	0.979	—	—	—*	$3.19E-18$
				—	—	—	$8.7E-12$
P-8501-1	In/P-MCT	0.59	0.716	0.35	0.87	0.20	$5.1E-23$
				—	—	0.15	$8.2E-18$
N-P-2	N/P	0.58	0.68	—	—	—	—
				—	—	0.4	$3.2E-17$
CdTe	Au/N-CdTe	1	1.49	—	—	8.7	$1.89E-15$

* 经离子注入样品的 N_T/N_D 很大, 参数会有较大误差, 因此未列入。

$\text{Ag}/\text{N}-\text{MCT}(\text{Au})$, $E_1=0.3 E_g$; 对另两种肖特基结, 由于只做了单一组份, 因此尚不能确定是否有类似的关系。经 B 离子注入的 $x=0.76$ 的 N 型材料, $E_v-E_1=0.23 \text{ eV}$; 对 $x=0.6$ 的 P 型材料上的 In/P-MOT 结, $E_1-E_v=0.08 \text{ eV}$ 。

四、讨 论

1. 深能级 E_1

从上述结果可见, 除汞扩散 N-P 结外, 在其他有外来金属原子参与的器件中都观察到深度不同的 E_1 。显然, E_1 与这些外来原子有关。虽然还不清楚具体的缺陷机构, 但可以估计, 由于碲镉汞中的 Hg—Te 键稳定性低, 当表面淀积金属膜如 Al、In 时, 金属原子会破坏 Hg—Te 键而形成金属碲化物界面层^[9]。可以用表面分析手段研究表面层的具体结构, 而对于电学特性, 起码它会导致禁带中出现新的深能级。界面层中, 金属原子不破坏 Cd—Te 键, 因而同一金属原子引入的深能级会呈现出某种随 x 变化的关系, 如本文的结果, 这是合理的。产生这一能级的具体缺陷模型尚有待研究。

2. 深能级 E_2

E_2 能级的出现与器件种类无关, 似乎是某种材料自身引起的。Polla 等人在研究窄带范围碲镉汞混晶时, 也观察到位于禁带中央的深能级。事实上, 不但在碲镉汞混晶中, 而且在许多 III-V 族化合物半导体中都观察到禁带中央深能级的存在^[10]。已有许多理论和实验研究这一能级的物理机相, 一般认为这

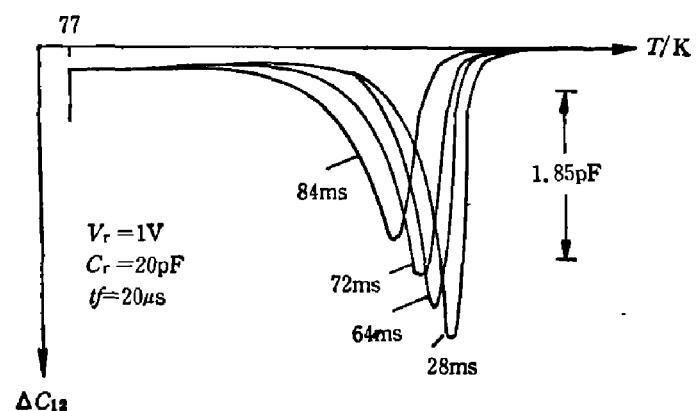


图 5 E_2 能级的 ΔC_{12} 与 t_2 的关系

Fig. 5 Variation of ΔC_{12} of E_2 peak versus t_2 .

是由于某一种杂质原子取代了正常格点原子而产生的^[11, 12]。更具体的缺陷机构尚无定论。从我们目前实验的结果, 我们还不能对此作出论断。

除经硼离子注入的 N 型材料肖特基结外, 对其他器件测得的 E_2 平均俘获截面为 $\bar{\sigma}_n = 10^{-16} \text{ cm}^2$, $\bar{\sigma}_p = 10^{-17} \text{ cm}^2$ 。此能级又位于禁带中央, 因而能起到有效的肖克莱-里德复合中心的作用。

3. 碲镉汞混晶中的深能级展宽现象

本实验中, 数据处理是基于电容瞬态过程按单一时间常数作指数衰减这一前提进行的, 实际上也得到直线形的阿雷尼尔斯图。细致分析表明, 实际情况与上述前提有一些差异。从图 5 可见, E_2 能级谱峰高度随脉冲周期 t_2 而变就是一个例证。

引起瞬态过程偏离简单指数关系的原因很多, 对碲镉汞这类混晶我们认为主要原因是合金无序深能级展宽。在 III-V 族三元混晶如 $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ 中也有类似现象。最近 C. W. Myles^[13]等对碲镉汞中合金无序深能级展宽作了理论计算, 他们假定禁带中央能级是杂质替位 Te 格点产生的, 考虑最近邻 Cd 和 Hg 原子的不同配置的影响, 导出深能级展宽及其与组份的关系。我们采用王占国^[13, 14]等提出的合金无序深能级展宽服从高斯分布的模式, 对实验结果作了拟合计算, 按高斯分布, 电容瞬态可表示为

$$C(t) = \int_0^\infty g(E_{ai}) C_0 \exp[-e_n(E_{ai})t] dE_{ai}, \quad (2)$$

其中 $g(E_{ai}) = (\sqrt{2\pi}S)^{-1} \exp[-(E_{ai} - \Delta E_T)^2/2S^2]$, S 为能级展宽度。对不同 x 值的两个样品 E_2 能级的谱峰作了计算, 结果见图 6。

展宽度 S 是计算峰高的参量, 为得到样品的 S 值, 可根据 S 与谱峰半宽度 ΔT 关系作图 7。根据实验曲线半宽度可求得该深能级的展宽度 S 。两个样品结果分别为 $x=0.83$, $S=55$ meV; $x=0.76$, $S=60$ meV。这一结果比 C. W. Myles 的理论计算值约大 10 meV, 随组份变化的趋势是相同的。

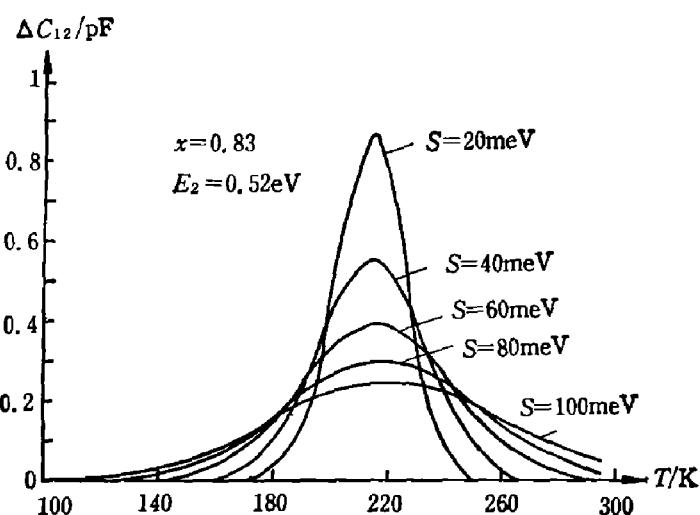


图 6 能级展宽度不同的DLTS 谱峰模拟图

Fig. 6 Simulated DLTS spectra with the different alloy broadenings.

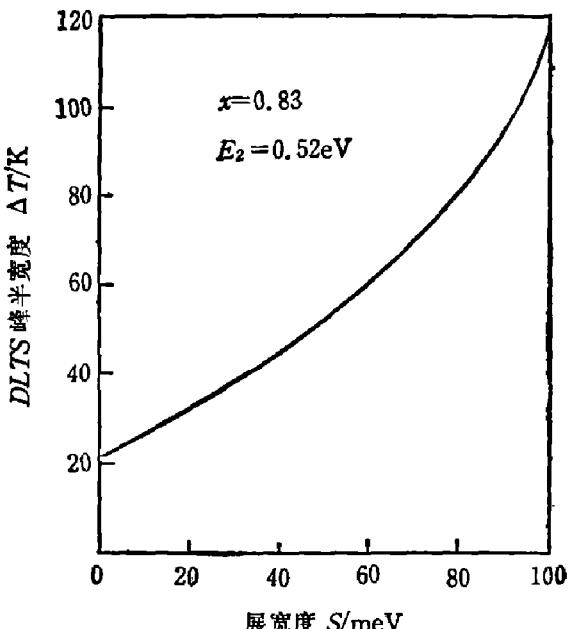


图 7 根据图 6 得到的谱峰半宽度与展宽度关系

Fig. 7 Full peak half-width ΔT plotted as a function of broadening parameter S for the DLTS spectra in Fig. 6.

从图 6 可见, 虽然能级有展宽, 但这一展宽并不影响峰的位置, 表明 DLTS 法对于由合金无序导致深能级的展宽而引起的非指数电容瞬态过程仍然是有效的, 由此得到的 Arrhenius 图也是直线。但此时得到的激活能应理解为平均激活能。由于这时谱峰高度与展宽有关, 因此由谱峰高度推导出来的浓度值应加以修正。这是用 DLTS 法测量碲镉汞混晶时应注意的问题。

五、结 论

用 DLTS 法首次对高 Cd 组份碲镉汞的深能级进行了初步研究。与窄禁带情况相似, 在此组份范围内观察到位于禁带中央的深能级 E_2 。还观察到与金、铝、铟以及硼离子注入相关的一系列深能级 E_1 。具体的缺陷结构还有待进一步研究。

由于三元混晶的结构特点, 碲镉汞混晶的深能级有展宽的现象, 利用展宽的高斯分布模型, 解释了实验中出现的电容瞬态并非简单的指数过程。用计算机对 E_2 能级作拟合计算,

得到与组份有关的能级展宽度,这是碲镉汞深能级研究中应加以注意的问题。

致谢——梁宏林同志协助制作计算机模拟图,特此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] Polla D. L. and Jones C. E., *Solid State Communication*, Vol. 36, P. 809.
- [2] 童斐明、杨秀珍等,半导体学报, 5(1984), 3: 307.
- [3] Jones C. E. et al., *J. Vac. Sci. Technol.*, 21(1) (1982), 187.
- [4] Lang D. V., *J. Appl. Phys.*, 45(1974), 3023.
- [5] Hanson G. L, Schmidt J. L. and Casselman T. N., *J. Appl. Phys.*, 53(1982), 7099.
- [6] Rozer M. et al., *Annales Des Télécommunications*, Tome 38(1983), 1~2
- [7] Zhang J., Thèse, Université, de Dijon, France, 1982.
- [8] Kruse P. W., *Semiconductors and Semimetals*, Ed. R. K. Willardson and A. C. Beer, Academic Press, New York, 1981, Vol. 16, P. 194.
- [9] Daris G. D. et al., *J. Appl. phys.*, 57(1985), 6:1915.
- [10] J. S. Blakemore, *Mapping Extrinsic Properties of Semi-Insulating GaAs Crystals*, a lecture given in Kunming Institute of Physics, China, 1986.
- [11] Kobayashi A. et al., *physical Review*, B25(1982), 10:6367.
- [12] Myles C. W. and Ford W. C., *J. Vac. Sci. Technol.*, A4(4) (1986), 2195~99.
- [13] Omling P., Samuelson L. and Grimmeiss H. G., *J. Appl. Phys.*, 54(1983), 5117.
- [14] 王占国,半导体学报, 6(1985), 2:132.

DEEP LEVEL STUDIES OF HIGH-CD COMPOSITION MCT BY DLTS

TANG XIAOHUI ZHANG JINGSHAO SONG BINGWEN

(Kunming Institute of Physics)

ABSTRACT

The experimental results are presented of DLTS studies of deep levels in high-Cd composition $Hg_{1-x}Cd_xTe(x>0.5)$ alloys, a candidate for the fabrication of detectors used in long wavelength ($1.3\sim1.55\mu m$) fibre optic telecommunication systems. A mid-gap deep level is discovered. Besides, several other deep levels related to the experimental devices are also observed. Detailed studies of the mid-gap level have shown that the capacitance transients are nonexponential. Based on the alloy disorder energy broadening model, the broadened values of the mid-gap level are obtained by computer simulations.