

96,15(2) 81-86

116/P18-1A/015/002

用室温红外透射谱研究 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 外延薄膜的组份分布

褚君浩 李标 刘坤 汤定元

81-160

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家实验室, 上海, 200083)

A

摘要 根据 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 本征吸收系数的经验公式及 Hougen 模型, 建立了一种用室温红外透射谱研究 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 外延薄膜组份均匀性的方法, 用这种方法检测了 LPE、MBE、MOCVD 薄膜的组份分布, 并与二次离子质谱 (SIMS) 测量结果进行了比较.

关键词 $Hg_{1-x}Cd_xTe$, 红外透射谱, 外延薄膜.

TN304.26
TN213

引言

$HgCdTe$

$Hg_{1-x}Cd_xTe$ 外延薄膜已成为制造红外探测器的主要材料. 外延材料与体单晶相比, 不仅位错密度低、缺陷少, 而且横向组份的均匀性很好. 然而, 由于 $HgCdTe$ 与 $CdTe$ 衬底间化学势不平衡, 生长过程中组元间的互扩散无法克服, 造成外延材料纵向组份不均匀, 影响器件的工作性能^[1]. 因此, 必须有一种简单有效的方法来检验 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 材料的组份分布.

①

常用的检测样品组份的方法如 SIMS^[2]、电子探针等, 需要样品解理, 台面腐蚀^[3]或刻蚀处理, 这些破坏性测量手段不适用于器件制备. 近年来, 我们尝试用室温红外透射光谱来判定样品组份的均匀性^[3-7], 因为它具有非破坏性及快速简便的特点. 最近, 我们提出了一系列表达 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 本征吸收系数^[8,9]及折射率^[10]的经验公式, 据此, 可以利用室温红外透射光谱检测 MBE、MOCVD 及 LPE 等外延薄膜的组份分布, 其结果与 SIMS 和电子探针测试数据吻合较好.

1 计算模型

$Hg_{1-x}Cd_xTe$ 的本征吸收边规律是计算的理论依据. 如果在入射光照面积内样品的组份不均匀, 则会使吸收边变倾斜, 若外延层较薄还将发现本征吸收区的形状也会改变. 分析测量得到的吸收边和本征吸收光谱, 可推导出待测样品光照面积内组份的不均匀程度.

对于具有 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 双层结构的外延样品, 当一束光照射到其表面时, 存在空气/MCT 外延层(下标 1)、外延层/ $CdTe$ 衬底(下标 2)、衬底/空气(下标 3) 3 个界面的多次反射^[6], 总的透过率 $T_{1,3}$ 为

$$T_{1,3} = \frac{(1-R_1)(1-H)T_{2,3}a_1}{1-R_1(1-H)R_{2,3}(a_1)^2} \quad (1)$$

式中 a_1 表示外延层的吸收率, T 为透过率, R 为反射率, 可由折射率公式^[10]求得.

对于具有 HgCdTe/CdTe/GaAs 三层结构的样品, 如 MBE、MOCVD 薄膜, 必须考虑空气/MCT 外延层(下标 1)、外延层/CdTe 缓冲层(下标 2)、缓冲层/GaAs 衬底(下标 3)、衬底/空气(下标 4)4 个界面的多次反射, 如图 1. 总的透过率 $T_{1,4}$ 为

$$T_{1,4} = \frac{(1-R_1)(1-H)T_{2,4}a_1}{1-R_1(1-H)R_{2,4}(a_1)^2}. \quad (2)$$

公式(1)和(2)中的参量 H 表示入射光在外延层表面的损失, 在计算过程中作为一个变量, 通过调节 H 使计算曲线与实测透过率在最大值处相等.

由于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延层的纵向组份不均匀, 该层的吸收应与不同位置处的组份值 $x(z)$ 有关, 即

$$\alpha_{\text{MCT}}(k, T)d = \int_0^d \alpha[k, T, x(z)]dz, \quad (3)$$

其中 α 为 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的吸收系数, d 为外延层的厚度, k 为波数, T 为温度. 众所周知, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的吸收曲线是由 Urbach 吸收带尾和 Kane 区的本征吸收组成的. $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的本征吸收边符合 Urbach 吸收规则^[8]

$$\alpha = \alpha_0 \exp[\delta(E - E_0)/kT]. \quad (4)$$

其中各参数的定义见文献[8]. Kane 区本征吸收系数与能量也满足一种指数依赖关系^[9]:

$$\alpha = \alpha_e \exp[\beta(E - E_g)]^{1/2}, \quad (5)$$

式中 $\beta(T, x) = -1 + 0.083T + (21 - 0.13T)x$.

假设不考虑外延样品横向组份的不均匀性, 其纵向组份的分布可以写为^[6]

$$x(z) = \frac{1 - (x_1 + sd)}{1 + 4(z/\Delta z)^2} + (x_1 + sd) - sz, \quad (6)$$

式中 z 是外延层离开衬底的距离, $x_1, s, \Delta z$ 是拟合参数, 这 3 个参数不是完全独立的, x_1 与延层表面组份有关, Δz 是与过渡区宽度有关的参数, 主要影响透射光谱上 0%~10% T_{max} 的区域, s 与外延层组份的纵向变化率有关, 可由 30%~80% T_{max} 处透射曲线的斜率决定.

将式(3)~(6)代入式(1)或(2), 可求出外延样品的透过率, 在计算过程中可不断调节式(6)中的参数 $x_1, s, \Delta z$ 及公式(1)和(2)中的 H , 使计算结果与实测的透过曲线吻合. 一旦二者完全重合, 参数 $x_1, s, \Delta z$ 也就确定, 外延层组份的纵向分布便可由式(6)求得, 整个拟合过程可以通过计算机程序实现.

实际拟合过程中, 有时候会发生这样的情况: 即无论怎样调节 $x_1, s, \Delta z$ 的值, 计算曲线均不能与实验数据完全符合, 这是由样品的横向组份不均匀所致^[5,7,11]. 在 Hougen 模型中没有计及横向组份的影响, 而实际情况则必须同时考虑横向、纵向组份不均匀性的作用. 假

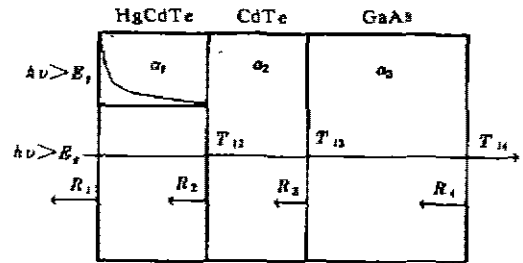


图 1 HgCdTe/CdTe/GaAs 三层结构的吸收、反射和透射示意图

Fig 1. Schematic of absorption, reflection and transmission of HgCdTe/CdTe/GaAs structure

设 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 晶片组份的横向分布符合对数正态形式^[6], 则外延层中距界面 x 处的组份为

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma x(x)} \exp\left\{-\frac{[\log[x(x)] - x]^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (7)$$

式中 $f(x)$ 为组份分布的几率函数, x 为实际组份, σ 为反映组份分布离散性的均方差. 式(7)说明在 $x(x) - 2\sigma$ 到 $x(x) + 2\sigma$ 区间组份分布的几率为 95.44%, 可用于表征实际样品的组份分布.

2 结果与讨论

实验分别选用 LPE、MBE 和 MOCVD 技术生长的薄膜样品, 其厚度为 4~20 μm . LPE 生长时用 CdTe 为衬底, MBE 及 MOCVD 生长则用 GaAs 衬底, 在 GaAs 上先长一层约 5 μm 的缓冲层, 再外延 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄膜. 为了更好地了解外延层中组份的纵向分布情况, 一般选用横向组份均匀的样品. 判断横向组份分布的简便方法就是用小光斑测量样品的透过率, 看不同点处的透过曲线是否重合^[4,5].

测试前, 样品要经有机溶液清洗、溴甲醇腐蚀, 并用去离子水冲洗. 用 PE983 红外分光光度仪测量样品的透过率, 其精度可达 10^{-3} , 光斑直径 $\phi = 3\text{mm}$. SIMS 测量在复旦大学微电子分析中心进行, 采用 CAMECA 公司生产的 IMS-3f 型仪器, 为确保测量的精确性(特别是避免样品发热而引起 Hg 脱附现象), 使用低能量(10~12.5keV)和低离子流密度($\approx 150 \mu\text{A}/\text{cm}^2$)的一次 O_2^+ 离子束轰击样品表面, 其对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 层的刻蚀速率约为 0.8 $\mu\text{m}/\text{min}$.

图 2(a)、(b)、(c) 为室温下 MBE、LPE 和 MOCVD 外延样品的透射光谱. 图中圆点为实验数据, 实线为式(1)~(6)的拟合曲线, 虚线是式(7)的计算结果, 拟合所得的参数见表 1. 对于 MBE 和 MOCVD 样品, 测试的透射光谱中有干涉条纹, 这将影响参量 H 的准确确定, 但 H 值对实际组份分布并无影响. 由图可知, 对 MBE 样品, 拟合曲线(实线)与实验结果符合得很好; 而对 LPE 和 MOCVD 样品, 仅考虑纵向组份变化的透射曲线(实线)还不能很好地说明实验结果, 只有同时考虑横向组份的不均匀性(虚线), 计算值与实验点才能完全对应. 为此, 我们还用小光斑测量了不同样品的透过曲线, 发现对 MBE 样品, 不同测试点的透过率形状基本相同, 其横向组份无甚变化; 但对 LPE 及 MOCVD 样品, 不同点处的透射曲线有所不同, 即样品的横向组份存在不均匀性^[5,7].

通过拟合室温透过率可求出样品的组份分布. 图 3 为图 2(a)中 MBE 样品的纵向组份分布曲线, 图 3(a)为式(6)的计算结果, 实线表示 Cd 含量分布, 虚线为 Hg 含量. (b) 为 Hg 和 Te 含量的 SIMS 谱, N 为二次离子计数, t 为刻蚀时间. 其离子束对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延层的刻蚀速率约为 0.8 $\mu\text{m}/\text{min}$. 样品的表面组份可由电子探针测量. 由 SIMS 谱中 Te 含量的分布情况可知 CdTe/HgCdTe 的界面距表面约 4 μm , 与用干涉条纹计算的外延层厚度相同. 薄膜层表面对透射率的影响较大, 由式(6)确定的表面组份值(0.239)与用电子探针测量的结果(0.2378)基本吻合. 图 3 中随着由表面向界面的靠近, 外延层中组份呈递增趋势, 在 CdTe/HgCdTe 过渡区则迅速变化到 1, 从图中可见由室温透射光谱拟合得到的过渡区宽度要比 SIMS 测量的结果略小一些.

图 4 为图 2(b)中 LPE 样品组份的空间分布(即同时考虑了组份的横向和纵向不均匀

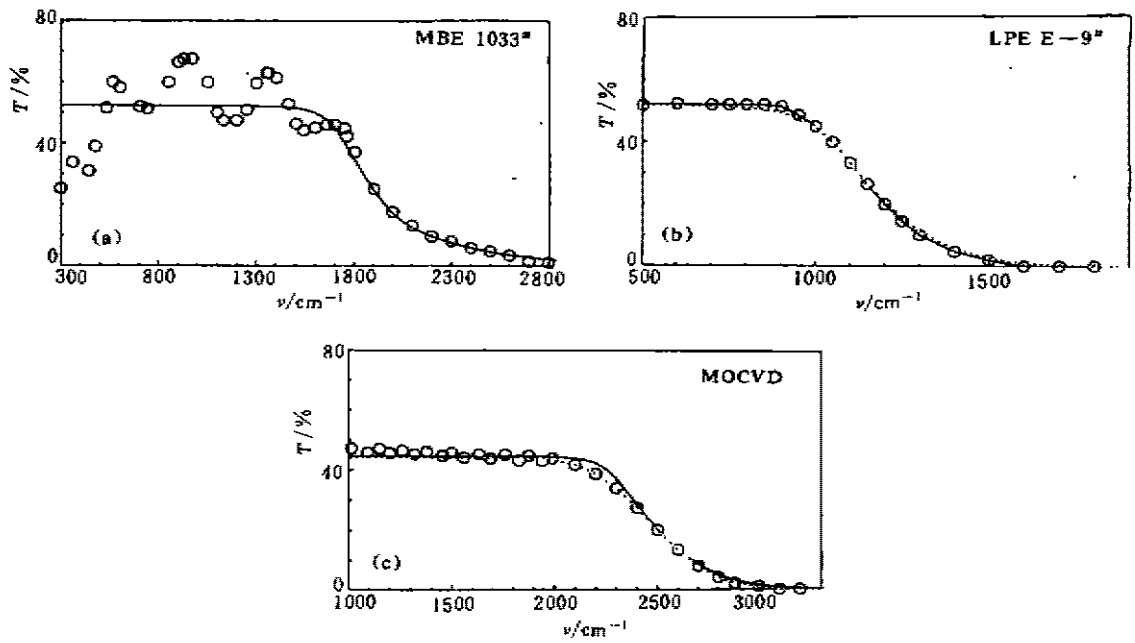


图2 室温下(a) MBE、(b) LPE、(c) MOCVD 样品的透射光谱
 Fig 2. Transmission of MBE (a), LPE (b) and MOCVD (c) samples at room temperature

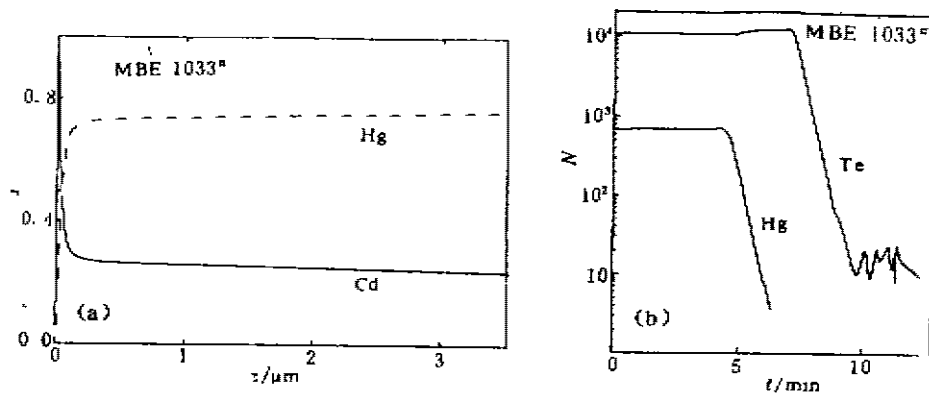


图3 MBE 样品的纵向组份分布曲线,(a)计算结果,(b) Hg,Te 含量的 SIMS 谱
 Fig 3. Longitudinal composition profile of MBE sample
 (a) the calculated results, (b) the SIMS measurement

性). 图 4(a)为式(7)的计算结果,(b)中实线为 SIMS 测量曲线,虚线为由式(6)计算的纵向组份. 由 SIMS 谱可知 LPE 外延层的厚度约为 $16\mu\text{m}$. 根据式(7)计算的表面组份值为 0.186 ± 0.0015 , 而电子探针的测量结果为 0.1854 , 两者差别不大. 由图 4 可知, 计算得到的纵向组份分布曲线与 SIMS 测量结果基本符合.

同样可获得 MOCVD 样品组份空间分布. 由表 1 可知, 样品在 HgCdTe/CdTe 界面的过渡区参数 $\Delta z = 0.4\mu\text{m}$, 在该区内组份由 1 变到 0.466 , 在过渡区之外的生长方向, 组份从 0.466 变到 0.289 , 组份的横向非均匀性 $\sigma = 0.005$. 为与实验比较, 我们用小光斑($\phi = 1\text{mm}$)

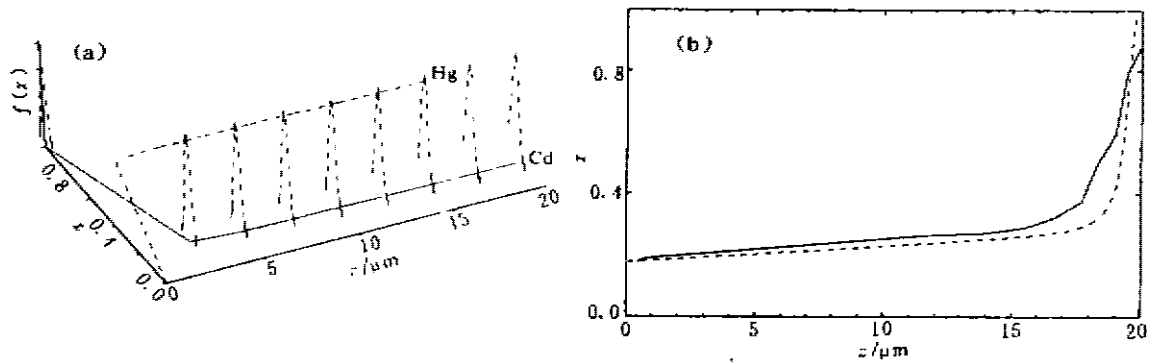


图 4 LPE 样品组份的空间分布

Fig 4. Spatial composition distribution of LPE sample

测量了大光斑内不同位置的室温透过率, 并逐点进行拟合, 发现其表面组份分别为 0.2892、0.2901、0.2884、0.2896, 可见横向组份的离散程度在模型给出的范围内.

表 1 MBE、LPE、MOCVD 样品的拟合参数

Table 1 The fitting parameters of MBE, LPE and MOCVD samples

生长方法	表面组份 x_s	斜率 $S(\text{l/cm})$	过渡区宽度 $dz(\mu\text{m})$	H	横向组份均方差 σ
MBE	0.2366	86	0.05	0	
LPE	0.176	51	0.08	0	0.0015
MOCVD	0.289	104	0.4	0.15	0.005

图 5 为外延样品在室温及液氮温度下的透射曲线, 其中圆点为实验数据, 实线为计算结果. 计算时先根据室温透射光谱确定式(6)中 x_s 、 s 、 Δz 值, 然后只改变温度, 令 $T = 77\text{K}$, 代入式(1)~(6)求出 77K 时的透射率. 可见此时计算结果仍与实验符合, 说明用我们的拟合模型可外推到低温情况.

3 结论

本文根据 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的吸收边及本征吸收规律, 提出了一种用室温红外透射光谱拟合外延薄膜组份分布的方法, 并建立了相应的计算软件. 这种方法具有快速非破坏性的特点, 且与实际组份分布情况符合.

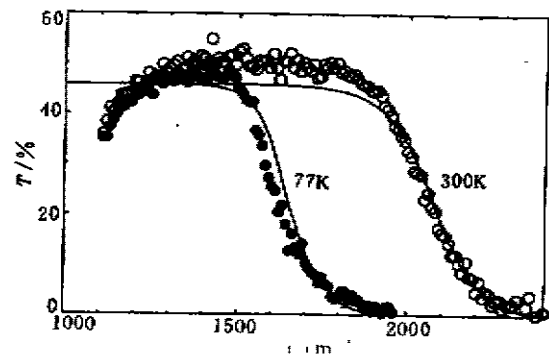


图 5 外延薄膜在室温及液氮温度下的透射曲线

Fig 5. Transmittance spectra of epitaxial film at 300K and 77K

参考文献

- 1 Edwall D D, Gertner E R, Tennant W E. *J. Appl. Phys.*, 1984, **55**:1453
- 2 Bubulac L O, Edwall D D, Cheung J T. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1992, **10**:1633
- 3 Price S L, Boyd P R. *Semicond. Sci. Technol.*, 1993, **8**:842
- 4 Chu J H, Xu S Q, Tang D Y. *Appl. Phys. Lett.*, 1983, **43**:1064
- 5 褚君浩, 苗景伟, 石 桥, 等. *红外与毫米波学报*, 1992, **11**(5):411
- 6 Hougén C A. *Appl. Phys.*, 1989, **66**:3763
- 7 Gopal V, Ashokan R, Dhar V. *Infrared Phys.*, 1992, **33**:39
- 8 Chu J H, Mi Z Y, Tang D Y. *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**(8):3955
- 9 Chu J H, Li B, Liu K, et al. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**:1234
- 10 Liu K, Chu J H, Tang D Y. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**:4176
- 11 Li B, Chu J H, Liu K, et al. *J. Physics C*, 1995, **7**:29
- 12 Liu K, Chu J H, Li B, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**:2818

INVESTIGATION ON COMPOSITION PROFILE OF $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ EPI-LAYER BY ROOM TEMPERATURE INFRARED TRANSMISSION

Chu Junhao Li Biao Liu Kun Tang Dingyuan

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Abstract Based on the empirical rules of intrinsic absorption coefficient in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ and Hougén's model, a useful method for determining the composition profile of an epitaxy layer from the room temperature infrared transmittance spectroscopy was established. The composition nonuniformity along the depth of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ film samples grown by LPE, MOCVD and MBE techniques was figured out by using this method and compared with that from the second ion mass spectroscopy (SIMS) measurement.

Key words $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, infrared transmission, epilayers.