

0197-202

利用 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 本征区反射峰确定其截止波数和组分*

TN213
TN304, 26
TN204
TN214

李向阳* 胡晓宁* 朱文娟* 陆慧庆 赵军 龚海梅 方家熊

(中国科学院上海技术物理研究所, 传感技术国家重点实验室, 上海, 200083)

摘要 利用 FTIR 光谱仪测量了一组 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 样品的透射和反射光谱, 利用透射光谱确定样品的组分, 在反射光谱中明显地观察到一个反射极大点, 考虑直接带隙样品的吸收系数以及 K-K 关系, 理论分析得到反射极大点出现的范围为 $E_g < \hbar\omega_m < 2E_g$, 通过反射极大点的波数与截止波数的比较, 得出两者之间存在正比关系的结论, 其比例常数为 1.092.

关键词 碲镉汞, 反射峰, 截止波数, 组分.

本征区 光谱

引言

调节 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 组分 x 可以得到不同禁带宽度的材料, 以制备 $2\sim 20\mu m$ 范围内各种波段的本征型红外探测器, 由于禁带宽度决定器件的截止波长, 因此要使器件对某一特定波段有较好的响应就必须选择合适的禁带宽度, 即选择合适的组分 x 和温度 $T^{[1,2]}$. 为此, 准确判定 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 的组分及截止波长是十分必要的.

测量 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶片组分的方法有很多, 大体可分为直接法和间接法两类^[2]. 直接法以密度法为代表, 准确度较差; 间接法以傅里叶变换红外 (FTIR) 透射法为代表, 它是测量 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶片组分的常用方法, 然而, 如果样品很薄或者加载在衬底上, 由于干涉以及衬底等的影响, 测量结果就不容易分析计算.

我们在透射法基础上用反射法进行了测量, 提出了利用反射峰位确定晶片组分和截止波长的方法, 并给出了经验公式, 分析表明该方法能在一定程度上克服透射法的缺点.

1 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 的本征区附近的透射和反射光谱的测量

$Hg_{1-x}Cd_xTe$ 样品是采用移动加热器法 (Travelling Heater Method) 生长的体材料, 晶片经常规霍尔测试后, 再经过粗磨、精抛、腐蚀, 然后进行透射和反射光谱的测量, 样品的厚度一般在 $600\sim 700\mu m$. 用 BIO-RAD FTS 175 FTI 光谱仪进行透射测量, 反射光谱则是由 NICOLET Magma-IRTM Spectrometer 750 FTIR 的室温红外显微镜测得的. 我们在参考文献[3]中曾详细论述了关于透射光谱的测量和分析结果, 这里给出最后结果和一条典型的曲线, 分别见表 1 和图 1 的曲线 1. 反射测量时, 样品置于可动平台之上, 入射光束聚焦于样品表面, 中心线与样品的法线方向成 40° 角, 反射光被光学系统收集回仪器内部, 图 2 是光路示

* 山东大学红外遥感研究室, 山东, 济南, 250100
稿件收到日期 1997-11-24, 修改稿收到日期 1998-02-10

意图. 每次测量都仔细调节聚焦的位置使得仪器采到的信号最大, 然后开始测量. 测量采用64次扫描, 波数分辨率为 2cm^{-1} . 用镀金玻片作为反射率为100%的参考. 图1中曲线2是同一样品的反射谱. 由图可以明显地看出反射比存在一个极大值. 我们发现这个极大值所在波数位置与 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 组分有关, 因此可以用来确定样品的组分. 样品的反射极大所在位置的波数与计算得到的样品截止波数都列于表1, 以便比较. 需要说明的是, 由于反射光谱是用红外显微镜测量的, 因此, 即使我们采用大的通光孔径, 样品表面所聚焦的光斑直径通常也小于1mm, 仍无法与透射方法的大光斑相比. 事实上, 这正是显微镜测量的优点: 可以测量有关量的面分布, 这就存在着一个微区测量与大面积测量的可比性问题, 幸运的是我们采用样品的横向组分均匀性比较好, 在测量中选取不同的区域进行反射测量, 同一样品的反射峰位基本保持不变.

表1 用透射法确定的组分以及透射和反射测量结果的部分特征数值
Table 1 Composition obtained from the transmittance measurement and some characteristic values of transmittance and reflectance spectra

样品编号	组分 (x)	截止波数 $\nu_{\text{cutoff}}(\text{cm}^{-1})$	反射峰波数 $\nu_{\text{refl}}(\text{cm}^{-1})$
1	0.3675	3078	3335
2	0.3185	2546	2770
3	0.3114	2468	2675
4	0.2914	2126	2357
5	0.2647	1960	2157
6	0.2510	1810	1956
7	0.2400	1689	1815
8	0.2391	1680	1827
9	0.2261	1536	1697
10	0.2041	1292	1497

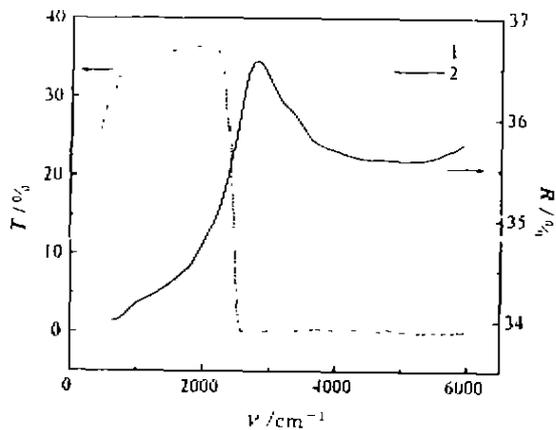


图1 同一样品的典型透射和反射曲线
Fig. 1 The typical transmittance and reflectance spectra of the same sample

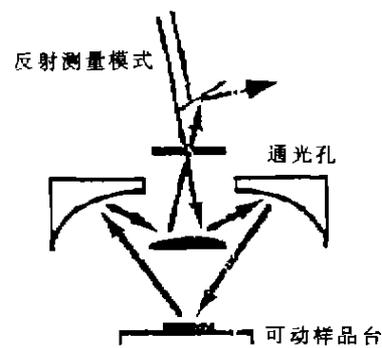


图2 反射测试光路示意图
Fig. 2 The schematic diagram of reflectance spectra measurements

2 反射光谱的极大值

对于 HgCdTe 材料,当入射红外光的光子能量($E = \hbar\omega$)等于禁带宽度 E_g 时,它对光子有强烈的吸收,对应于布里渊区 Γ 点的 M_0 型跃迁,也就是说,频率 ω 满足 $\hbar\omega = E_g$ 时, HgCdTe 的吸收系数有陡然变化的吸收边.理论分析和实验测量表明:忽略 Burstein-Moss (B-M) 效应的影响, E_g 附近的吸收系数可以形式地写为^[4,5]

$$\alpha(E) = \begin{cases} \beta \sqrt{\frac{W_0}{e}} \exp\left(\frac{E - E_g}{W_0}\right), & \left(E \leq E_g + \frac{W_0}{2}\right) \\ \beta \sqrt{E - E_g}, & \left(E \geq E_g + \frac{W_0}{2}\right) \end{cases} \quad (1)$$

其中 β 是与组分 x 和温度 T 有关的常量, W_0 是待定参数,它反映了吸收边的展宽,通常只有几个到十几个 meV, e 为自然对数的底.由式(1)可以看出,在 $E = E_g$ 附近吸收系数随频率有剧烈的变化.利用著名的 Kramers-Kronig (K-K) 关系可以从吸收谱求得折射率的色散关系 $n(\omega)$, 公式为

$$n(\omega) = 1 + \frac{c}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\alpha(\omega')}{d\omega'} \log \left| \frac{\omega' + \omega}{\omega' - \omega} \right| d\omega'. \quad (2)$$

可以看出,式中 $\log(\)$ 项起着权重函数的作用,当 $\omega' \rightarrow \omega$ 时,对数值变得很大,而 ω' 远离所研究频率 ω 时,对数值迅速减小,使得 ω 附近吸收系数变化 $d\alpha(\omega)/d\omega$ 对积分有最大的贡献.考虑式(1),可以预料 $n(\omega)$ 在 $\hbar\omega = E_g$ 处有一极大值,这一现象即所谓的折射率增强效应^[5~7].这个折射率增强效应使得材料的折射率色散关系在吸收边附近有如下关系:

$$\frac{dn(\omega)}{d\omega} > 0, \quad (\hbar\omega < E_g) \quad (3a)$$

$$\frac{dn(\omega)}{d\omega} < 0, \quad (\hbar\omega > E_g) \quad (3b)$$

事实上,这一关系也可以从文献[5]的图 2 以及文献[6]的图 2~4 中分析得出.

利用厚样品正入射的反射比公式作为近似公式,我们得到

$$\frac{dR(\omega)}{d\omega} = (\epsilon_1 - 1) \frac{dn(\omega)}{d\omega} + \epsilon_2 \frac{dk(\omega)}{d\omega}, \quad (4)$$

其中 $\epsilon_1 = n^2(\omega) - k^2(\omega)$, $\epsilon_2 = 2n(\omega)k(\omega)$ 分别为复介电常数的实部和虚部, $k(\omega) = \frac{\alpha(\omega) \cdot C}{2\omega}$ 为消光系数.

考虑反射光谱,设极大值处的频率为 ω_m , 则有

$$\left. \frac{dR(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega=\omega_m} = \left[(\epsilon_1 - 1) \frac{dn(\omega)}{d\omega} + \epsilon_2 \frac{dk(\omega)}{d\omega} \right]_{\omega=\omega_m} = 0. \quad (5)$$

这就是求解 ω_m 的方程.原则上我们利用这个方程可以确定 ω_m 的值,从而确定出 ω_m 与组分的关系.就作者所知,人们目前还没有看到 $E > E_g$ 范围内的 $n(\omega)$ 的解析表达式,因此,暂无

法从理论上给出公式. 不过, 我们还是能够对反射峰位的范围进行初步的分析. 由于我们关心的频率范围位于吸收边附近, 因而有 $(\epsilon_1 - 1) > 0, \epsilon_2 > 0$, 所以要使式(5)成立必须有 $n(\omega)$ 和 $k(\omega)$ 在 ω_m 点的导数异号. 利用式(1), 经过求导数计算, 我们发现在 E_g 附近, $E < 2E_g$ 的范围之内总有

$$\frac{dk(\omega)}{d\omega} > 0. \quad (6)$$

结合式(3)、(5)和(6)可知

$$E_g < \hbar \omega_m < 2E_g. \quad (7)$$

事实上, 由于 $\frac{dn(\omega)}{d\omega}$ 只有在 E_g 附近才有较大的数值^[1-7], 因此我们能够估计 ω_m 出现在离 E_g 不远处. 由于 HgCdTe 的本征吸收区内的吸收系数一般至少大于 $2 \times 10^3 \text{cm}^{-1}$ ^[4], 因而光的穿透深度也不大, 最大不超过 $5 \mu\text{m}$. 我们认为这一峰值只反映出表面一层材料特性信息, 基本不受样品厚度的影响, 因而也就不受样品有无衬底的影响.

3 经验公式

以上分析表明反射比极大的波数位置 ν_m 与样品的禁带宽度亦即截止波数 ν_{cutoff} 有密切关系. 确定两者之间的关系, 对于那些无法做透射测量或者透射测量不能有效反映表面状况的情况会有很大的帮助. 我们首先利用透射测量得到样品的组分 x . 计算采用了 Micklethwaite 的经验公式^[8], 组分为

$$\left. \begin{aligned} x &= x_0 + (1.038 \times 10^{-2} + 1.65 \times 10^{-6} Zn) \left[\frac{\ln(d/500)}{1 + x_0} \right], \\ x_0 &= 0.07901 + 1.101 \times 10^{-4} Zn - 6.179 \times 10^{-9} Zn^2. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

其中 Zn 为起峰波数 (Cut-on wavenumber), 是透射曲线的峰高的 $1/e$ 处作一切线的横坐标截距; d 为样品的厚度, 单位为 μm . 样品的禁带宽度 E_g (300K) 的计算采用了 Hansen 的经验公式^[9]:

$$\begin{aligned} E_g(x, T) &= -0.302 + 1.93x - 0.81x^2 + \\ &8.32x^3 + 5.35 \times 10^{-4}(1 - 2x)T. \end{aligned} \quad (9)$$

截止波数则由下式给出:

$$\nu_{\text{cutoff}} = \frac{E_g}{1.24 \times 10^{-4}} (\text{cm}^{-1}). \quad (10)$$

计算结果就是表 1 中的第三列. 为了研究截止波数 ν_{cutoff} 与反射极大的波数 ν_m 的相互关系, 我们以 ν_{cutoff} 作为横坐标, ν_m 作为纵坐标, 将结果示于图 3. 显然, 两者是线性关系. 考虑以 k 为参数的拟合公式 $\nu_m = k\nu_{\text{cutoff}}$, 利用 Marquardt-Levenberg 算法对 k 进行拟合, 通过使实验值和计算值之间的方差之和最小, 得到如下经验公式:

$$\nu_m = 1.092\nu_{\text{cutoff}}. \quad (11)$$

其中 k 的拟合值为 1.092, 是渐进标准误差为 5.514×10^{-3} . 图 3 中的直线是斜率为 1.092 的拟合结果

利用经验公式(11), 只要测量了反射光谱, 确定了极大值的位置, 然后依次利用式(11)、(10)和(9)就可以求出截止波数和组分.

需要指出的是, 我们测量中所用的样品是非有意掺杂的近本征 n 型样品, 室温下费密能级刚刚进入导带或者仍在禁带中, 因此我们忽略了 B-M 效应. 对于高浓度样品, B-M 效应不可忽略, 这时运用经验公式(11)时要特别小心.

4 结语

采用 FTIR 方法测量了一组 HgCdTe 样品的透射反射光谱, 提出了利用反射极大的波数位置确定截止波数和组分的方法和经验公式. 通过分析表明, 此方法基本不受样品厚度的影响. 因为这一方法有非破坏性、近表面分析等特点, 有望在器件工艺过程中和各种处理后的表面组分判断以及横向和纵向组分均匀性测试等方面有实用价值意义.

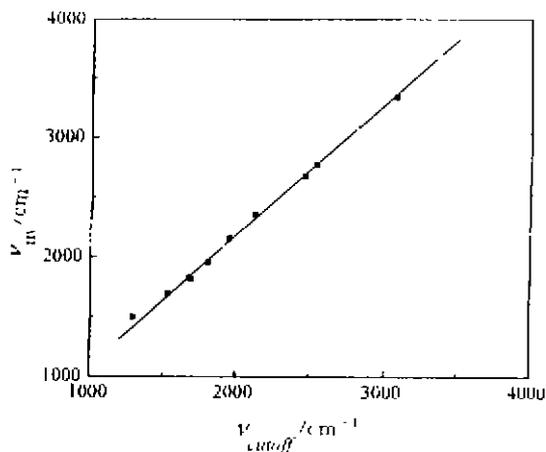


图 3 反射峰波数与截止波数的关系
(点为测量线, 线为拟合结果)

Fig. 3 The wavenumber of the reflectance peak vs. cutoff wavenumber (the dots are the measured values, and the line is the best fit)

REFERENCES

- 1 Willardson R K. *Semiconductors and Semimetals*, 1981, **18**:1
- 2 Price S L, Phillip R B. *Semicond. Sci. Technol.*, 1993, **8**:842
- 3 Gong H M, et al. *J. Infrared Millim. Waves* (龚海梅, 等. *红外与毫米波学报*), 1997, **16**:316
- 4 Chu J H, Li B, Liu K, et al. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**:1234
- 5 Hermann K H, Melzer V. *Infrared phys. & Technol.*, 1996, **37**:753
- 6 Liu K, Chu J H, Tang D Y. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**:4176
- 7 Jensen B, Torabi A. *J. Appl. Phys.*, 1983, **54**:5945
- 8 Micklethwaite W F H. *J. Appl. Phys.*, 1988, **63**: 2382
- 9 Hanson G L, Schmit J I, Casselman T N. *J. Appl. Phys.*, 1982, **53**: 7099

DETERMINATION OF CUTOFF WAVENUMBER AND COMPOSITION FOR HgCdTe USING THE PEAK OF THE REFLECTANCE SPECTRUM IN THE INTRINSIC REGION*

LI Xiang-Yang^{*} HU Xiao-Ning ZHU Wen-Juan^{*} LU Hui-Qing
ZHAO Jun GONG Hai-Mei FANG Jia-Xiong

*(State Key Laboratory of Transducer Technology, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 2000083, China)*

Abstract Transmittance and reflectance spectra measurements were carried out for a series of HgCdTe samples by FTIR spectrometer. Transmittance curve was used to determine the composition of each sample. An obvious peak was observed in the reflectance spectrum. By considering the dispersion of the absorption coefficient of direct band gap samples and K-K relation, theoretical analysis show this peak appears in the region of $E_g < \hbar\omega_m < 2E_g$. Through comparison of the wavenumber of the peak in the reflectance spectrum with the cut-off wavenumber, the direct proportion relationship of them was obtained and the proportion coefficient is 1.092.

Key words HgCdTe, peak in reflectance spectrum, cut-off wavenumber, composition.

* Infrared and Remote Sensing Laboratory, Shandong University, Jinan, Shandong 250100, China

Received 1997-11-24, revised 1998-02-10