

УДК 621.383.4/5

Расчёт показателя преломления эпитаксиальных слоёв КРТ

М.Д. Корнеева, В.В. Сало, А.В. Никонов, К.О. Болтарь, Н.И. Яковлева

Проведен анализ существующих моделей показателя преломления КРТ. Разработана усовершенствованная модель показателя преломления, основанная на уравнениях Хёви-Вандамма и Крамерса-Кронига. Усовершенствована методика определения характеристик многослойных ГЭС КРТ по спектрам ИК-пропускания. Использование новой модели показателя преломления позволило уменьшить значения среднеквадратичных отклонений расчётных зависимостей от экспериментальных на 1–2% для сложных структур, выращенных методами МЛЭ и осаждением из МОС.

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp, 85.60.Dw

Ключевые слова: CdHgTe, инфракрасный (ИК) спектральный диапазон, гетероэпитаксиальные структуры, показатель преломления, спектры пропускания.

Введение

Развитие новых методов выращивания $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, и прежде всего, молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), позволило решить ряд технологических проблем и создать многослойные гетероструктуры кадмий-ртуть-теллур (КРТ) для изготовления фотодиодных матриц большого формата. Метод МЛЭ позволяет получать многослойные гетероэпитаксиальные структуры $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с заданным типом проводимости, значением состава (мольной доли CdTe) и концентрации примеси по толщине слоев. Слои структуры с разным типом проводимости образуют $p-n$ -переходы, которые используются для формирования чувствительных элементов. Структуры с $p-n$ -переходами предназначены для изготовления двухдиапазонных матричных фотоприемных устройств (ДФПУ), которые позволяют повысить вероятность обнаружения и идентификации объектов за счет использования их признаков в обоих

диапазонах, измерять абсолютные значения температуры и решать ряд других задач.

Матричные фотоприемные устройства на основе тройных полупроводниковых соединений КРТ являются ключевым элементом для построения современных оптико-электронных систем инфракрасного диапазона спектра [1–3].

В настоящее время в России ведутся разработки технологии изготовления новых полупроводниковых материалов на основе гетероэпитаксиальных структур (ГЭС) КРТ. Особое внимание уделяется матричным фотоприёмникам второго и третьего поколений, для создания которых используются ГЭС p -типа проводимости и сложные структуры, формирующиеся с использованием варизонных, буферных, запорных слоёв, а также структуры с тремя и более рабочими слоями.

Для прогнозирования выходных параметров фотоприемных устройств необходимо знать характеристики исходных слоев, в частности, коэффициенты преломления фоточувствительных, буферных и других слоев, входящих в ГЭС КРТ, которые не только отличаются друг от друга, но и зависят от длины волны излучения. Зависимости показателя преломления КРТ, полученные зарубежными исследователями [4–6], достаточно хорошо описывают поведение однослойных структур [7], но не позволяют учесть особенности многослойных ГЭС КРТ при исследовании спектров пропускания и отражения.

В данной работе представлена усовершенствованная модель показателя преломления полупроводниковых материалов применительно к тройным соединениям кадмий-ртуть-теллур. Проведено моделирование спектров пропускания и определение характеристик многослойных гетероэпитаксиальных структур твердого раство-

Корнеева Марина Дамировна, первый заместитель генерального директора — директор по экономике и финансам¹, профессор².

Сало Владимир Васильевич, советник генерального директора¹.

Никонов Антон Викторович, инженер 2-й категории¹, аспирант².

Болтарь Константин Олегович, начальник НТК¹, профессор².

Яковлева Наталья Ивановна, зам. начальника НИЦ¹.

¹ОАО «НПО «Орион»».

Россия, 111396, Москва, шоссе Энтузиастов, 46/2

Тел.: (499) 374–81–30. E-mail: orion@orion-ir.ru

²Московский физико-технический институт.

Россия, 141700, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 20 октября 2013 г.

© Корнеева М.Д., Сало В.В., Никонов А.В., Болтарь К.О., Яковлева Н.И., 2013

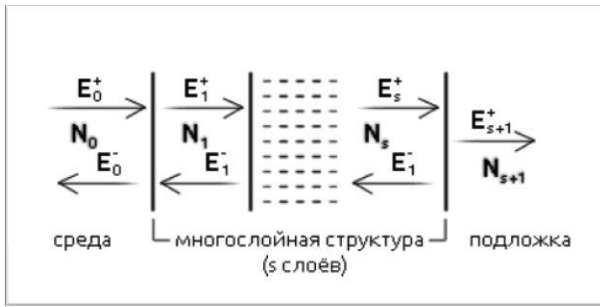


Рис. 1. Многослойная структура КРТ.

ра кадмий-ртуть-теллур, выращенных методами молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и могиридной эпитаксии (МОС) из металлоорганических соединений.

Модель спектра ИК-пропускания

Вопрос прохождения излучения через многослойные полупроводниковые структуры изучен рядом авторов [7–9]. Для вычисления спектров отражения и пропускания гетероэпитаксиальных структур $Hg_{1-x}Cd_xTe$ устанавливается связь амплитуд падающего излучения E_0^+ с отраженным E_0^- и излучением, прошедшим образец, с учётом поглощения в каждом слое и многократных отражений от границ раздела между соседними слоями.

Рассмотрим полупроводник, на который нанесено многослойное покрытие (рис. 1).

Используя матричный метод Абея для многослойной структуры КРТ [10], определяются соотношения между амплитудами падающего (E_0^+), отраженного (E_0^-) и прошедшего через структуру (E_{s+1}^+) излучений:

$$\begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} = \left[\prod_{j=1}^{s+1} t_j \right]^{-1} \cdot \left[\prod_{j=1}^s M_j \right] \cdot \begin{pmatrix} 1 & r_{s+1} \\ r_{s+1} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_{s+1}^+ \\ 0 \end{pmatrix}$$

Данное уравнение учитывает поглощение в каждом слое m (толщина слоя d_m , N_m — комплексный показатель преломления, действительная часть которого вычисляется по расширенной модели Крамерса-Кронига), описывающееся характеристической матрицей следующего вида:

$$M_{m+1} = \begin{pmatrix} \exp(i\delta_{m+1}) & r_{m+1} \exp(-i\delta_{m+1}) \\ r_{m+1} \exp(i\delta_{m+1}) & \exp(-i\delta_{m+1}) \end{pmatrix},$$

где

$$\delta_m = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) N_m d_m = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) (n_m - ik_m) d_m;$$

а также учитывается переход между слоями, определяемый с помощью коэффициентов Френеля:

$$r_{m+1} = \frac{N_m - N_{m+1}}{N_m + N_{m+1}}, \quad t_{m+1} = \frac{2N_m}{N_m + N_{m+1}}$$

Из общего уравнения, связывающего электрические векторы падающего, отраженного и про-

шедшего излучений в рассматриваемом многослойном покрытии, определяются отношение мощности излучения, отраженного от первой поверхности раздела, к мощности падающего излучения (коэффициент отражения)

$$R = \left| \frac{E_0^-}{E_0^+} \right|^2$$

и отношение мощности излучения, прошедшего в подложку, к мощности излучения, падающего на первую поверхность раздела (коэффициент пропускания),

$$T = \frac{n_{s+1}}{n_0} \left| \frac{E_{s+1}^+}{E_0^+} \right|^2.$$

Особенностью используемого метода является учёт не только поглощения в подложке, но и отражения от границы воздух—подложка. Коэффициент поглощения в подложке описывается формулой:

$$T_{sub} = \frac{t_{sub} \cdot Att}{1 - r_{sub} \cdot R_1 \cdot Att^2},$$

где

$$Att = \exp\left(-\frac{conc}{\lambda}\right),$$

$$t_{sub} = \frac{4 \cdot N_{sub} \cdot N_0}{(N_{sub} + N_0)^2},$$

$$r_{sub} = \frac{(N_{sub} - N_0)^2}{(N_{sub} + N_0)^2},$$

N_0 — показатель преломления среды, N_{sub} — показатель преломления подложки, $conc$ — характерный параметр поглощения.

Модели показателя преломления КРТ

Фундаментальные свойства КРТ ($Hg_{1-x}Cd_xTe$) обеспечивают высокие параметры по обнаружительной способности и чувствительности приемников. Контроль оптических свойств полупроводниковых материалов — поглощения, пропускания, отражения и преломления — базируется на оптических константах материалов, таких как показатель преломления и коэффициент экстинкции. Показатель преломления — важный параметр КРТ, отвечающий за понимание фундаментальных физических свойств материала.

Для большинства полупроводниковых материалов показатель преломления описывается уравнением дисперсии Селлмейера, которое представляет собой эмпирическое соотношение между показателем преломления n и длиной волны излучения λ :

$$n^2 = 1 + \frac{A_1 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_1^2} + \frac{A_2 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_2^2} + \frac{A_3 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_3^2} + \dots$$

где λ_i — постоянные, и $A_1, A_2, A_3, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ — коэффициенты Селлмейера, характерные для конкрет-

ного материала. Частными случаями уравнения дисперсии Селлмейера являются соотношения:

$$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - E},$$

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - \lambda_0^2} + \frac{C}{(\lambda^2 - \lambda_0^2)^2} + D\lambda^2 + E\lambda^4,$$

где A, B, C, D, E, λ_0 — характерные константы.

На основании уравнения дисперсии Селлмейера рядом исследователей [8] получена эмпирическая формула, демонстрирующая классическую зависимость показателя преломления КРТ от длины волны:

$$n(\lambda, T)^2 = A + \frac{B}{1 - (C/\lambda)^2} + D\lambda^2$$

где A, B, C, D — коэффициенты, изменяющиеся в зависимости от состава и температуры:

$$A = 13,173 - 9,852x + 2,909x^2 + 10^{-3} \cdot (300 - T)$$

$$B = 0,83 - 0,246x + 0,0961x^2 + 8 \cdot 10^{-4} \cdot (300 - T)$$

$$C = 6,706 - 14,437x + 8,531x^2 + 7 \cdot 10^{-4} \cdot (300 - T)$$

$$D = 1,953 \cdot 10^{-4} - 0,00128x + 1,853 \cdot 10^{-4} x^2$$

Такое соотношение применимо для материалов $Cd_xHg_{1-x}Te$ с составом, изменяющимся от 0,276 до 0,540 мол. дол. при температуре от 77 К до 300 К, а также для материалов с составом от 0,205 мол. дол. до 1 мол. дол. при комнатной температуре.

Представленная зависимость отражает поведение показателя преломления, который быстро уменьшается в диапазоне длин волн вблизи ширины запрещенной зоны, и медленно уменьшается при росте длины волны, в то время как теоретическая зависимость предсказывает быстрое уменьшение показателя преломления в относительно широком диапазоне длин волн — не только в пределах ширины запрещенной зоны, но также и на больших длинах волн.

В данной работе в качестве альтернативной модели показателя преломления рассматриваются соотношения Крамерса-Кронига, являющиеся удобным инструментом для исследования оптических констант полупроводниковых материалов. Реальная составляющая комплексного показателя преломления $N = n - ik$, где k — коэффициент экстинкции, представляется с помощью соотношений Крамерса-Кронига как:

$$n_a = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{k\omega}{\omega^2 - a^2} d\omega$$

где a — частота, которой соответствует показатель преломления. Используя связь между коэффициентом экстинкции и коэффициентом поглощения материала:

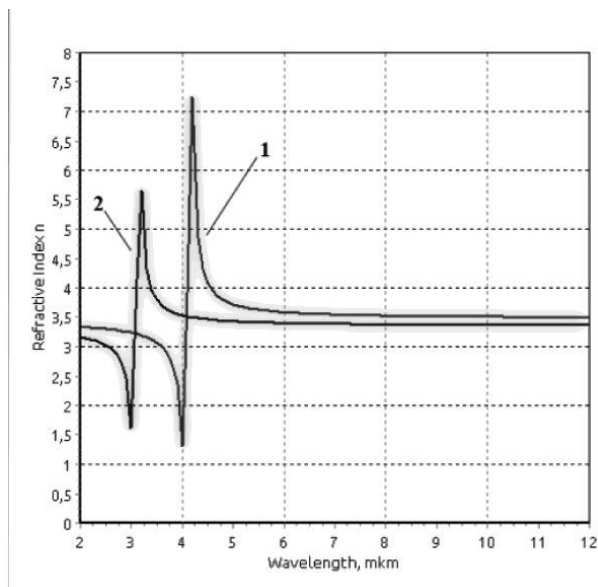


Рис. 2. Зависимость показателя преломления от длины волны. 1: $x = 0,2$ мол. дол., 2: $x = 0,3$ мол. дол.

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k}{\lambda},$$

соотношение Крамерса-Кронига для показателя преломления можно записать как:

$$n_a = 1 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\alpha(\lambda)}{1 - (\lambda/\lambda_a)^2} d\lambda.$$

Полученная зависимость описывает связь показателя преломления с коэффициентом поглощения полупроводника по длине волны. Эта зависимость также может быть представлена как связь показателя преломления с частотами ν и ν' :

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

Из полученной формулы следует, что графики показателя преломления будут иметь пик, положение которого обусловлено длиной волны, соответствующей ширине запрещенной зоны конкретного материала. В диапазоне длин волн вблизи границы полосы поглощения значение $d\alpha(\nu')/d\nu'$ высокое, и показатель преломления растёт с увеличением энергии фотонов. Тем не менее, когда значение энергии фотона достигает ширины запрещенной зоны, кривая поглощения изменяет наклон. Таким образом, $d\alpha(\nu')/d\nu'$ уменьшается на уровне больше ширины запрещенной зоны. За счёт такого поведения показателя поглощения возникает пик на графике зависимости показателя преломления, наблюдаемый на рис. 1 и 2.

Такая модель является наиболее эффективной для определения параметров ЭС КРТ, но не описывает в полной мере характер показателя преломления на больших длинах волн.

Для построения модели показателя преломления на больших длинах волн используются соотношения, которые связывают показатель пре-

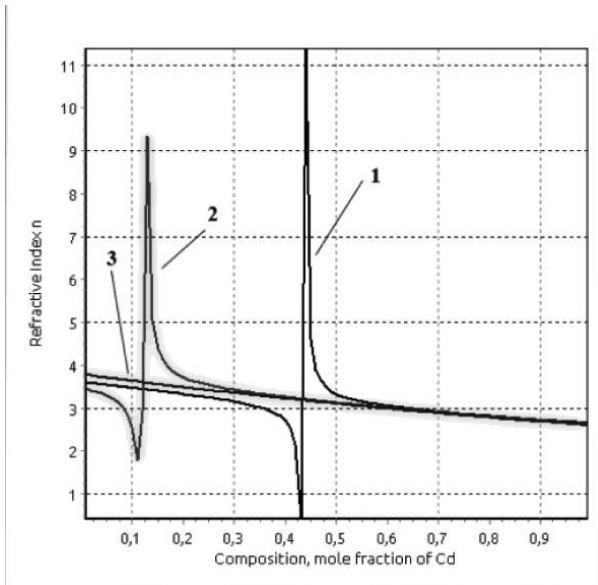


Рис. 3. Зависимость показателя преломления от состава: 1: $\lambda = 2$ мкм, 2: $\lambda = 5$ мкм, 3: $\lambda = 12$ мкм.

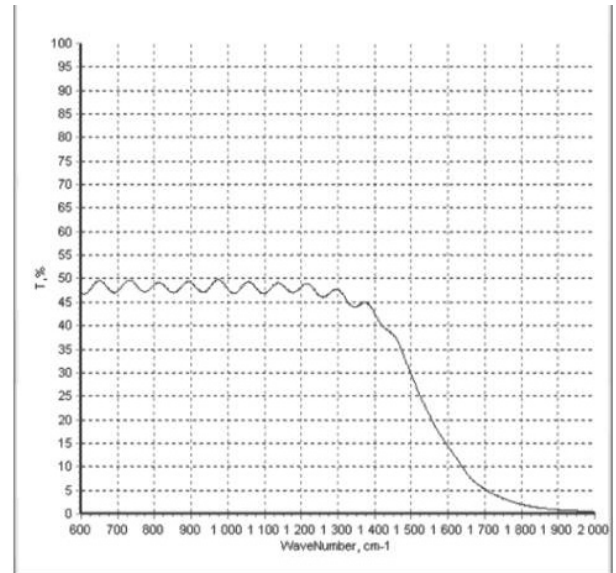


Рис. 4. Спектр пропускания однослойной структуры КРТ (экспериментальная характеристика).

ломления и ширину запрещенной зоны КРТ E_g . В данной работе применялась зависимость ширины запрещенной зоны от состава КРТ и температуры [8]:

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

где $0 \leq x \leq 1$, $4,2 \text{ K} \leq T \leq 300 \text{ K}$.

Наиболее подходящей зависимостью для описания поведения коэффициента преломления на больших длинах волн является уравнение Хёви-Вандамма:

$$n^2 = 1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2$$

$$A \approx 13,6 \text{ эВ}, B \approx 3,4 \text{ эВ}, dB/dT \approx 2,5 \cdot 10^5 \text{ эВ/К}.$$

Температурная зависимость показателя преломления (temperature coefficient of the refractive index, TCRI) полупроводника определяется как:

$$TCRI = \frac{1}{n} \cdot \frac{dn}{dT} = \frac{(n^2 - 1)^{3/2}}{13.6n^2} \cdot \left(\frac{dE_g}{dT} + \frac{dB}{dT} \right)$$

Характерные значения TCRI составляют от 10^{-6} до 10^{-4} K^{-1} .

Для моделирования коэффициента преломления наилучшие результаты получены при совместном использовании уравнения Хёви-Вандамма и расширенной модели Крамерса-Кронига.

Сравнение моделей расчета показателя преломления для однослойных структур

В ходе исследований проведены измерения, моделирование и анализ спектров пропускания однослойных структур КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Характерный спектр пропускания опытного образца однослойной структуры приведен на рис. 4. Эк-

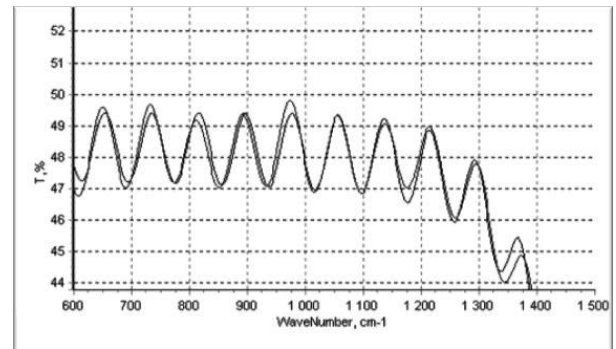


Рис. 5. Моделирование спектра пропускания однослойной структуры КРТ (классическая модель показателя преломления).

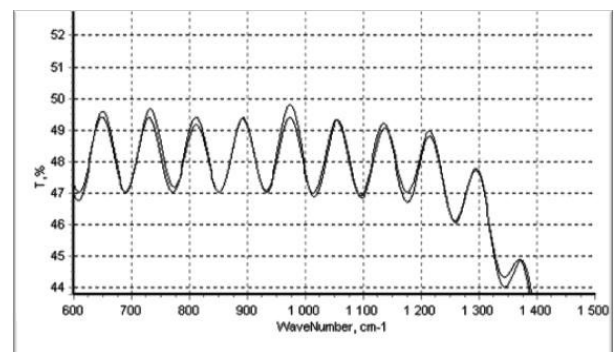


Рис. 6. Моделирование спектра пропускания однослойной структуры КРТ (расширенная модель показателя преломления).

периментальная характеристика демонстрирует зависимость формы спектра от параметров эпитаксиального слоя: состава, толщины, показателя преломления.

Проведено моделирование спектров пропускания с использованием классической и расширенной моделей показателя преломления. Результаты моделирования приведены в табл. 1 и на рис. 5 и 6.

Таблица 1

Образец: Э212-08-2	Паспортные данные	Классическая модель по- казателя преломления	Расширенная модель показателя преломления
Толщина рабочего слоя, мкм	20,0	17,7	17,9
Состав рабочего слоя, мол. дол.	0,223	0,222	0,222
Ошибка вычислений, %		0,3%	0,15%

Из визуального анализа рис. 5 и 6 следует, что в случае однослойных структур КРТ актуально использование обеих моделей, т.е. результаты моделирования практически идентичны и существенного расхождения с экспериментальной характеристикой не наблюдается. Пики модуляции совпадают по длинам волн. Результат расчёта состава и толщины рабочего слоя соответствует паспортным данным, но в случае расширенной модели ошибка вычислений значительно меньше по сравнению с классической моделью, а расчётные параметры находятся в лучшем со-

ответствии с заявленными паспортными характеристиками.

Исследование спектров пропускания сложных структур

На рис. 7 представлены экспериментальная характеристика и результаты моделирования спектра пропускания двухслойной структуры КРТ, выращенной методом МЛЭ на германиевой подложке с буферным слоем CdZnTe. Паспортные данные на структуру и результаты вычислений приведены в табл. 2.

Таблица 2

Спектр: МСТ76			
Параметр		Начальные данные	Результаты вычислений
Верхний варизонный слой	Толщина, мкм	0,50	0,35
	Состав, мол.дол.	0,30	0,30
	Неровность, мкм	0,1	0,1
Первый рабочий слой	Толщина, мкм	6,0	6,2
	Состав, мол.дол.	0,35	0,36
Второй рабочий слой	Толщина, мкм	4,0	3,7
	Состав, мол.дол.	0,40	0,39
Нижний варизонный слой	Толщина, мкм	0,5	0,44
	Состав, мол.дол.	0,50	0,51
Буферный слой	Толщина, мкм	6,0	6,7
Ошибка вычислений, %			2,5%

Соответствие параметров, представленных в сертификатах на ЭС КРТ МЛЭ и полученных в результате метода подгонки параметров по разработанной модели, удовлетворительное. Пики модуляции совпадают по длинам волн. Наблюдаемое несоответствие в графиках позволяет предположить наличие тонкого дополнительного слоя в структуре. Результат расчёта толщин слоёв соответствует паспортным данным. Применение усовершенствованной модели показателя преломления обеспечило большую сходимость расчётного графика к экспериментальному и позволило снизить ошибку вычислений параметров от 4% до 2,6%.

В рамках исследования проводился аналогичный расчёт характеристик ГЭС КРТ, выращенных методом эпитаксии металлоорганических соединений из газовой фазы. Данный метод выращивания в настоящий момент активно развивается

наравне с молекулярно-лучевой эпитаксией для получения сложных структур КРТ коротковолновой области спектра. Использование усовершенствованной модели показателя преломления позволило получить параметры структур с большей точностью по сравнению с классической моделью.

Заключение

Из соотношений Крамерса-Кронига получена зависимость показателя преломления от коэффициента поглощения КРТ. Совместно с уравнением Хёви-Вандамма зависимость формирует усовершенствованную модель показателя преломления, которая дополняет классическую модель показателя преломления КРТ и является применимой в более широком диапазоне значений используемых параметров.

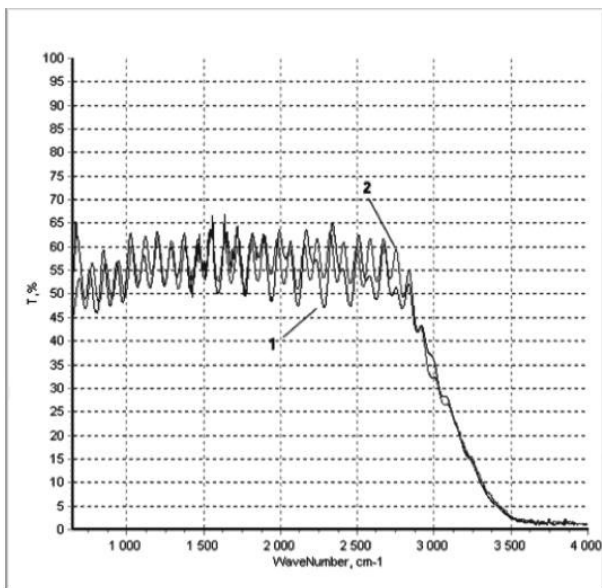


Рис. 7. Спектр пропускания двухслойной структуры КРТ, выращенной методом МЛЭ на германиевой подложке с буферным слоем CdZnTe (1 — экспериментальная характеристика, 2 — модель спектра).

Проведено сравнение эффективности моделей показателя преломления КРТ для однослойных ГЭС КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Проведён анализ спектров пропускания ГЭС, основанный на теоретической модели спектров ИК-пропускания. Результаты показали хорошее соответствие классической и усовершенствованной моделей показателя преломления.

Использование новой модели показателя преломления позволило уменьшить погрешность

вычисления параметров сложных структур, выращенных методами МЛЭ и осаждением из МОС, на 1–2%. Проведенные расчеты и экспериментальные исследования предоставили возможность совершенствования методик контроля многослойных ГЭС КРТ, необходимых для изготовления фотоприемных устройств нового поколения.

Литература

1. Филачев А.М., Таубкин И.И., Тришенков М.А. Твердотельная фотоэлектроника. — М.: Физматкнига, 2005
2. Болтарь К.О., Стафеев В.И., Бурлаков И.Д. и др., // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. № 10. С. 1257
3. Бурлаков И.Д., Пономаренко В.П., Филачев А.М., Дегтярев Е.В. // Прикладная физика. 2007. № 2. С. 43
4. Finkman E., Nemirovsky Y. // J Appl Phys. V. 50. P. 4356
5. Chu J., Sher A. Physics and properties of narrow gap semiconductors. Springer, 2008.
6. Kasap S., Capper P. Handbook of Electronic and Photonic Materials. Springer, 2006.
7. Болтарь К.О., Яковлева Н.И., Капшуба А.С., Удалова А.Г. // Прикладная физика. 2008. № 1. С. 26
8. Hansen G.L., Schmit J.L., Casselman T.N. // J Appl Phys. V. 53. P. 7099
9. Болтарь К.О., Федирко В.А. Определение параметров слоистых полупроводниковых структур методами Фурье спектроскопии. / Тезисы докладов V отраслевой конф. «Аналитические методы исследования материалов и изделий микроэлектроники». — М., ЦНИИ «Электроника», 1989
10. Болтарь К.О., Яковлева Н.И., Никонов А.В. // Прикладная физика. 2011. № 5. С.100

Refractive index of CdHgTe epitaxial layers

M.D. Korneeva¹, V.V. Salo¹, A.V. Nikonov^{1,2}, K.O. Boltar^{1,2}, and N.I. Yakovleva¹

¹Orion R&P Association
46/2 Entuziastov highway, 111123, Moscow, Russia
E-mail: orion@orion-ir.ru

²Moscow Institute of Physics and Technology
9 Institute al., Dolgoprudny, Moscow region, 141700, Russia

Refractive index model for CdHgTe heterostructures consisting of buffer, variband, photosensitive and other layers was made. Advanced refractive index model corresponded to classic model based on Herve-Vandamme and Kramers-Kronig equations. Multilayer CdHgTe heterostructures parameters calculation from transmission spectra was upgraded to new version. Calculations of CdHgTe heterostructures thickness and composition were made for samples grown by molecular-beam epitaxy and MOCVE epitaxy. Structure parameters were estimated with enhanced program.

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp, 85.60.Dw

Keywords: CdHgTe, infrared spectral range, refractive index, transmission spectrum, heteroepitaxial structure.