

УДК 621.383.4/5:621.315.5

Исследование спектров пропускания многослойных гетероэпитаксиальных структур

К. О. Болтарь, Н. И. Яковлева, А. В. Никонов

Разработан метод определения характеристик многослойных полупроводниковых структур по спектрам ИК-пропускания, и построена теоретическая математическая модель спектра пропускания, зависящая от коэффициента поглощения и ряда параметров эпитаксиальных слоев кадмий—ртуть—теллур (КРТ). Измерены и исследованы спектры ИК-пропускания эпитаксиальных структур (ЭС) твердых растворов КРТ. ЭС КРТ р-типа проводимости выращивались методами жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) на подложках CdZnTe и молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложках GaAs.

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

Ключевые слова: спектры ИК-пропускания, CdHgTe, эпитаксиальные слои, жидкофазная эпитаксия, молекулярно-лучевая эпитаксия.

Введение

Для изготовления односпектральных и много-спектральных фотоприемных устройств (ФПУ) широко используются гетероэпитаксиальные структуры (ГЭС) твердых растворов КРТ, которые остаются одним из лучших материалов для изготовления высокочувствительных фотоприемников инфракрасного диапазона спектра [1, 2]. Новое поколение тепловизионных приборов и приборов специального назначения основано на использовании в качестве ФПУ двухспектральных ГЭС КРТ, чувствительных в спектральных диапазонах 3—5 и 8—12 мкм, разработки которых проводятся в ряде тематических работ ФГУП «НПО "Орион"».

Постановка задачи

Исследования спектров пропускания многослойных ГЭС проводятся с помощью инфракрасной Фурье-спектроскопии. Перед разработчиками ФПУ остро стоит задача входного контроля и трактовки параметров многослойных ГЭС, спектры пропускания которых имеют особенности, не объяснимые с точки зрения традиционных методов анализа спектров пропускания и отражения.

Предложенная в данной работе модель спектра пропускания, основанная на матричном методе Абея, позволяет:

определить характеристики рабочих эпитаксиальных слоев КРТ, которые входят в ЭС (толщины и состав рабочих слоев, коэффициенты преломления);

исследовать влияние варизонных слоев на зависимость коэффициента пропускания и параметры ФПУ;

исследовать влияние буферных и запорных слоев на зависимость коэффициента пропускания.

Для построения модели спектра пропускания решены следующие задачи:

проанализированы литературные данные зависимости коэффициента преломления в материале КРТ от состава КРТ и длины волны излучения, а также исходных материалов подложек CdZnTe и GaAs;

разработан метод определения характеристик многослойных полупроводниковых структур по спектрам ИК-пропускания;

разработано программное обеспечение, позволяющее моделировать зависимости коэффициента пропускания и отражения по заданным параметрам (число слоев, их толщина, зависимости коэффициентов поглощения и преломления от волнового числа, состав рабочих слоев);

разработано программное обеспечение, позволяющее определять параметры рабочих слоев КРТ, входящих в ГЭС КРТ, путем приближения экспериментальной кривой с расчетной, варьируя начальные параметры.

Болтарь Константин Олегович, начальник НТЦ.
Яковлева Наталья Ивановна, начальник отдела НТЦ.
Никонов Антон Викторович, инженер.
ФГУП «НПО "Орион"».
Россия, 111123, Москва, Шоссе Энтузиастов, 46/ 2.
E-mail: orion@orion-ir.ru

Статья поступила в редакцию 20 сентября 2010 г.

© Болтарь К. О., Яковлева Н. И., Никонов А. В., 2011

В работе проведены исследования спектров пропускания многослойных ЭС твердого раствора КРТ, выращенных методами молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ), а также спектров пропускания многослойных эпитаксиальных структур с двумя поглощающими слоями различного состава, выращенных методом ЖФЭ.

Модель спектра ИК-пропускания

Вопрос прохождения излучения через многослойные полупроводниковые структуры (рис. 1) изучен рядом авторов [3—6]. Для вычисления спектров отражения и пропускания ГЭС КРТ необходимо установить связь интенсивностей падающего излучения E_{inc} с отраженным E_{refl} и излучением, прошедшим образец E_{trans} , учитывая поглощение в каждом слое и многократные отражения от границ раздела между соседними слоями.

Связь между электрическими векторами падающего, прошедшего и отраженного излучений в рассматриваемой многослойной структуре, представленной на рис. 1, может быть описана с помощью характеристической матрицы S перехода:

$$\begin{pmatrix} E_{refl} \\ E_{inc} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} 0 \\ E_{trans} \end{pmatrix}. \tag{1}$$

В случае многослойной структуры с числом слоев N характеристическая матрица перехода представима в виде:

$$S = \left(\prod_{k=1}^{N-1} H_{k,k+1} L_{k+1} \right) H_{N,N+1},$$

где $H_{k,k+1}$ — матрица перехода между слоями, описываемая с помощью коэффициентов преломления Френеля t_{k+1} и r_{k+1} ;

L_k — матрица распространения излучения в слое.

Эти матрицы можно выразить следующим образом:

$$H_{k,k+1} = \frac{1}{t_{k,k+1}} \begin{pmatrix} 1 & r_{k+1} \\ r_{k+1} & 1 \end{pmatrix};$$

$$L_{k+1} = \begin{pmatrix} \exp(-i\delta_{k+1}) & 0 \\ 0 & \exp(i\delta_{k+1}) \end{pmatrix}.$$

Сдвиг излучения по фазе описывается параметром

$$\delta_{m+1} = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) (n_{m+1} - ik_{m+1}) d_{m+1},$$

где $n_{m+1} - ik_{m+1}$ — комплексный показатель преломления для слоя $m+1$;

k_m — коэффициент экстинкции, являющийся мнимой частью показателя преломления и связанный с коэффициентом поглощения $\alpha_m(\lambda)$, соответствующим длине волны λ , соотношением

$$\alpha_m(\lambda) = \frac{4\pi k_m}{\lambda};$$

d_m — толщина слоя m .

Для расчета коэффициента поглощения КРТ использовалась модель из работы [7].

Из уравнения (1) можно определить отношение мощности излучения, отраженного от первой поверхности раздела, к мощности падающего излучения (коэффициент отражения) $r = \left| \frac{E_{refl}}{E_{inc}} \right|^2$ и от-

ношение мощности излучения, прошедшего в подложку, к мощности излучения, падающего на первую поверхность раздела (коэффициент про-

пускания), $t = \frac{n_{N+1}}{n_0} \left| \frac{E_{trans}}{E_{inc}} \right|^2$. Интерференция ИК-

излучения в подложке не учитывалась из-за большой расходимости ИК-излучения Фурье-спектрометров и большого отношения толщины подложки в длине волны. Особенностью используемого в данной работе метода являлось то, что в модели учитывалось поглощение в подложке и отражение от границы раздела воздух—подложка.

излучения в подложке не учитывалась из-за большой расходимости ИК-излучения Фурье-спектрометров и большого отношения толщины подложки в длине волны. Особенностью используемого в данной работе метода являлось то, что в модели учитывалось поглощение в подложке и отражение от границы раздела воздух—подложка.

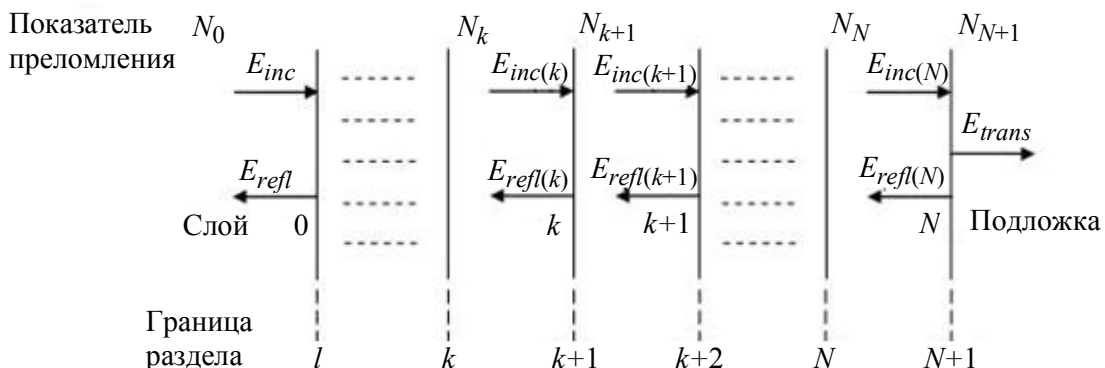


Рис. 1. Модель многослойной структуры

Коэффициент пропускания многослойной структуры с учетом механизмов прохождения излучения в подложке можно описать формулой

$$T = t \cdot \frac{t_{sub} \cdot Att}{1 - r_{sub} \cdot r' \cdot Att^2}, \quad (2)$$

где

$$Att = \exp\left(-\frac{conc}{\lambda}\right), \quad t_{sub} = \frac{4 \cdot n_{sub} \cdot n_0}{(n_{sub} + n_0)^2},$$

$$r_{sub} = \frac{(n_{sub} - n_0)^2}{(n_{sub} + n_0)^2},$$

где t_{sub} — коэффициент пропускания подложки;
 r_{sub} — коэффициент отражения на границе раздела воздух—подложка;
 r' — коэффициент отражения излучения на границе эпитаксиальная структура—подложка;
 n_0 — показатель преломления среды;
 n_{sub} — показатель преломления подложки;
 $conc$ — характерный параметр поглощения, зависящий от материала подложки [8, 9].

Метод расчета состава и толщины ЭС КРТ

Известны методики измерения состава, основанные на измерении спектров пропускания полупроводниковых структур [3—6] и толщины по количеству наблюдаемых интерференционных экстремумов и Фурье-анализу интерференционной картины спектра пропускания [6].

Метод измерений мольной доли CdTe в эпитаксиальном слое твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te$, толщины эпитаксиальных и буферных слоев, коэффициентов преломления в многослойных ГЭС КРТ, выращенных методами ЖФЭ и МЛЭ на подложках CdZnTe и GaAs, основан на сравнении экспериментальной и измеренной характеристик спектра пропускания ЭС КРТ при комнатной температуре и теоретически рассчитанной зависимости с помощью матричного метода Абея.

Экспериментальная характеристика спектра пропускания измеряется на Фурье-спектрометре путем сканирования образцов в диапазоне волновых чисел $500—5000 \text{ см}^{-1}$. В спектре пропускания отчетливо различаются две области, а именно, коротковолновая область $\nu > \nu_{0,5}$, в которой ИК-излучение сильно поглощается, и длинноволновая область $\nu < \nu_{0,5}$, в которой слой КРТ поглощает мало. Здесь $\nu_{0,5}$ — значение волнового числа, при котором пропускание уменьшается в два раза по сравнению с максимумом. В правой области спектра отчетливо видна область интерференции излу-

чения за счет многократных отражений от границ раздела воздух—КРТ—подложка.

Если в структуре КРТ присутствуют дополнительные слои, а именно, имеется несколько рабочих эпитаксиальных слоев, буферные слои и варизонные слои, то интерференционная картина приобретает сложный характер, так как включает в себя информацию не только о толщине эпитаксиальных, но и буферных слоев (рис. 2).

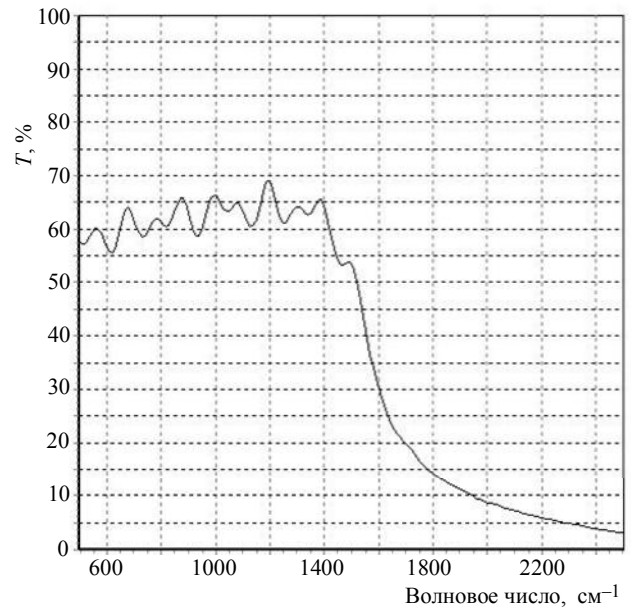


Рис. 2. Характерный спектр пропускания трехслойной структуры

Для реализации метода определения параметров ЭС КРТ и нахождения функции наилучшего приближения экспериментальной и теоретической характеристик разработано специальное программное обеспечение, которое основано на методе подгонки параметров на ЭВМ.

Спектр пропускания многослойной структуры $S_{отн}(\nu)$ можно представить в виде функции одной переменной ν (волнового числа) и N параметров $P_1 \dots P_N$, характеризующих исходные характеристики эпитаксиальных слоев КРТ, с коэффициентами поглощения $\alpha_1 \dots \alpha_N$, коэффициентами преломления $n_1 \dots n_N$ и толщинами слоев $d_1 \dots d_N$:

$$S_m = S_m(\nu, P_1 \dots P_N).$$

При условии правильности выбранных моделей расчета коэффициентов поглощения и преломления, а также корректности метода экспериментального измерения спектра пропускания при $K > N$ функционал

$$S(P_1 \dots P_N) = \sqrt{\sum_{k=1}^K (S_{отн}(\nu_k) - S_m(\nu_k, P_1 \dots P_N))^2} / K$$

будет иметь минимум при истинных значениях параметров $P_1 \dots P_N$ (K — количество точек в спектре).

Таким образом, минимизируя отклонения расчетной зависимости спектра пропускания от экспериментальной, можно рассчитать характеристику спектра пропускания, наиболее близкую к расчетной, и определить параметры исходной ЭС КРТ (состав x , толщину d , коэффициент преломления n).

В разработанном методе учитываются следующие начальные параметры:

состав эпитаксиальных слоев $Cd_xHg_{1-x}Te$, буферных и варизонных слоев;

неоднородность состава по толщине рабочих слоев $Cd_xHg_{1-x}Te$;

толщины эпитаксиальных слоев $Cd_xHg_{1-x}Te$, буферных и варизонных слоев;

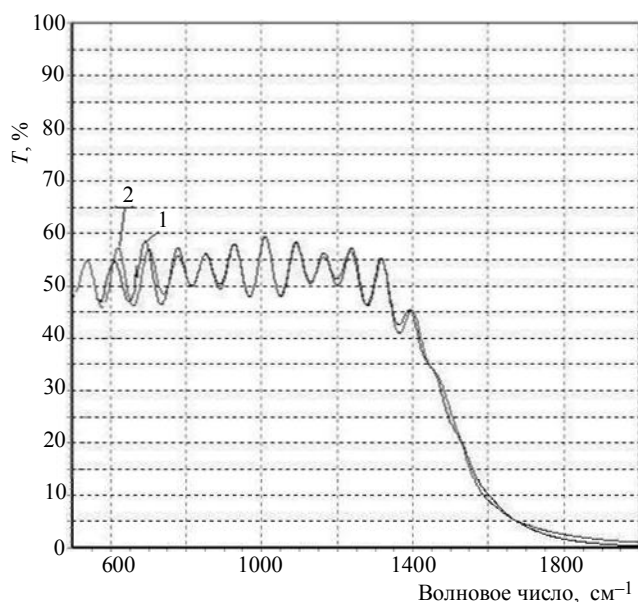
зависимости коэффициентов поглощения эпитаксиальных слоев от состава, температуры и длины волны;

зависимость коэффициента поглощения подложки от температуры и длины волны;

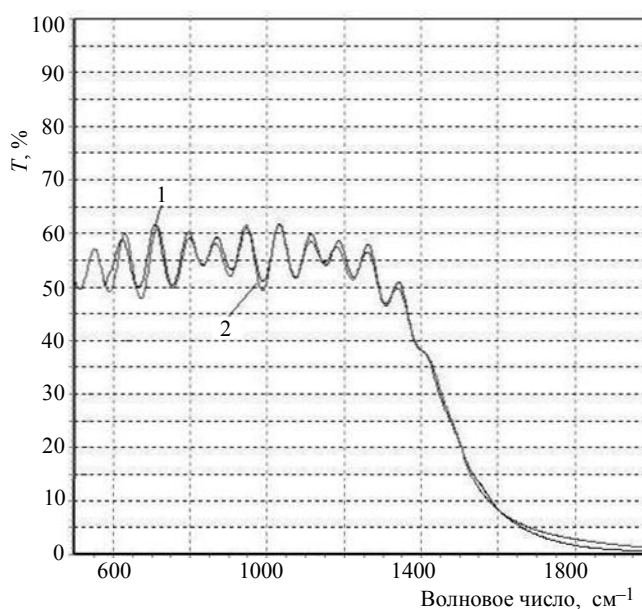
зависимости коэффициентов преломления эпитаксиальных слоев $Cd_xHg_{1-x}Te$ и подложки от длины волны.

Моделирование спектров пропускания многослойных структур

Проведено моделирование теоретической характеристики пропускания однослойных ЭС, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Результаты представлены на рис. 3, а, б и в табл. 1.



а



б

Рис. 3. Спектр пропускания образца КРТ081212-1-1 (а) и КРТ081212-1-3 (б): 1 — экспериментальный спектр пропускания; 2 — результат моделирования

Таблица 1

Параметр		Спектр КРТ081212-1-1		Спектр КРТ081212-1-3	
		Паспортные данные	Результаты расчета	Паспортные данные	Результаты расчета
Верхний варизонный слой	Толщина, мкм	1,00±0,05	0,9216	1,50±0,20	1,6876
	Состав, x	0,200	0,1981	0,200	0,2001
Рабочий слой	Толщина, мкм	12,00	12,2438	10,00	10,5625
	Состав, x	0,220	0,2174	0,210	0,2144
Нижний варизонный слой	Толщина, мкм	1,00	0,8821	1,50	1,5012
	Состав, x	0,300	0,2971	0,280	0,2781
Буферный слой	Толщина, мкм	5,00	4,9001	5,00	4,8125
Подложка	Поглощение, %	60	45	60	46
Ошибка вычислений			2,15293 %		1,96013 %

Соответствие параметров, представленных в сертификатах на ЭС КРТ и полученных в результате метода подгонки параметров по разработанной модели, удовлетворительное. Пики модуляции совпадают по длинам волн. В коротковолновой области спад спектра пропускания в теоретической модели более гладкий, чем в эксперименте. Это объясняется неоднородностью состава нижнего варизонного слоя. Полученное значение среднеквадратичного отклонения экспериментальных графиков от расчетных составляет порядка 1,9—2,2 %. Учет в модели резкого поглощения на длинноволновой области спектра позволяет улучшить точность расчетов и снизить отклонение до 0,5—1,0 %.

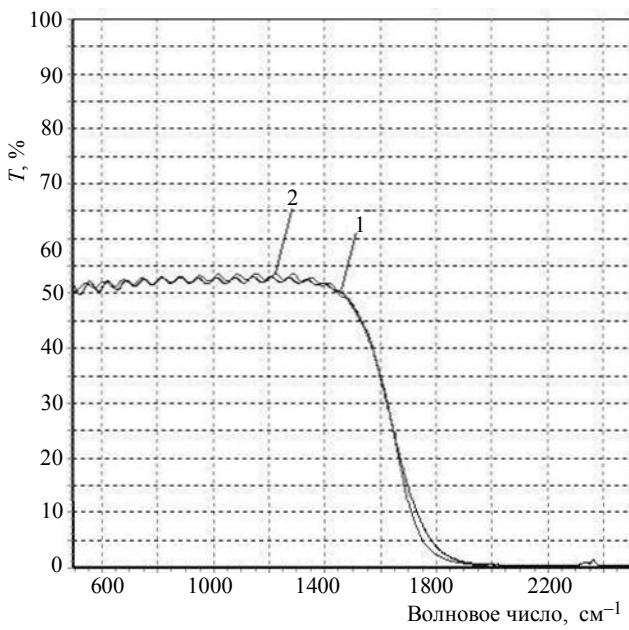
Проведено моделирование теоретической характеристики пропускания однослойных ЭС, выращенных методом ЖФЭ. Результаты представлены на рис. 4, а, б и в табл. 2.

Соответствие параметров, представленных в сертификатах на ЭС КРТ ЖФЭ и полученных в

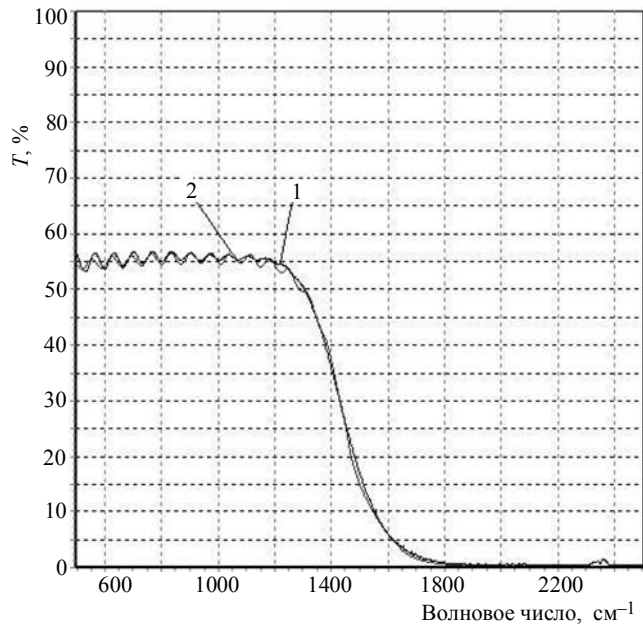
результате метода подгонки параметров, удовлетворительное. Результат расчета толщин соответствует паспортным данным (~20 мкм). Пики модуляции совпадают по длинам волн, но превышают измеренные амплитуды. Это объясняется неровностью толщины рабочего слоя, характерной для ЖФЭ. Несоответствия в коротковолновой области не наблюдаются. Полученное значение среднеквадратичного отклонения экспериментального графика от расчетного составляет порядка 0,85 %.

Проведено моделирование теоретической характеристики пропускания двухспектральных ЭС, выращенных методом ЖФЭ. Результаты представлены на рис. 5, а, б и в табл. 3.

Соответствие параметров, представленных в сертификатах на ЭС КРТ и полученных в результате метода подгонки параметров по разработанной модели, удовлетворительное. Результат расчета толщин соответствует паспортным данным. Пики модуляции совпадают по длинам волн.



а



б

Рис. 4. Спектр пропускания образца E26-03-t3 (а) и E26-03-t13 (б):
1 — экспериментальный спектр пропускания; 2 — результат моделирования

Таблица 2

Параметр		Спектр E26-03-t3		Спектр E26-03-t13	
		Паспортные данные	Результаты расчета	Паспортные данные	Результаты расчета
Рабочий слой	Толщина, мкм	21,00	21,2150	20,00	20,5620
	Состав, х	0,220	0,2347	0,220	0,2234
Ошибка вычислений			0,87374 %		0,83655 %

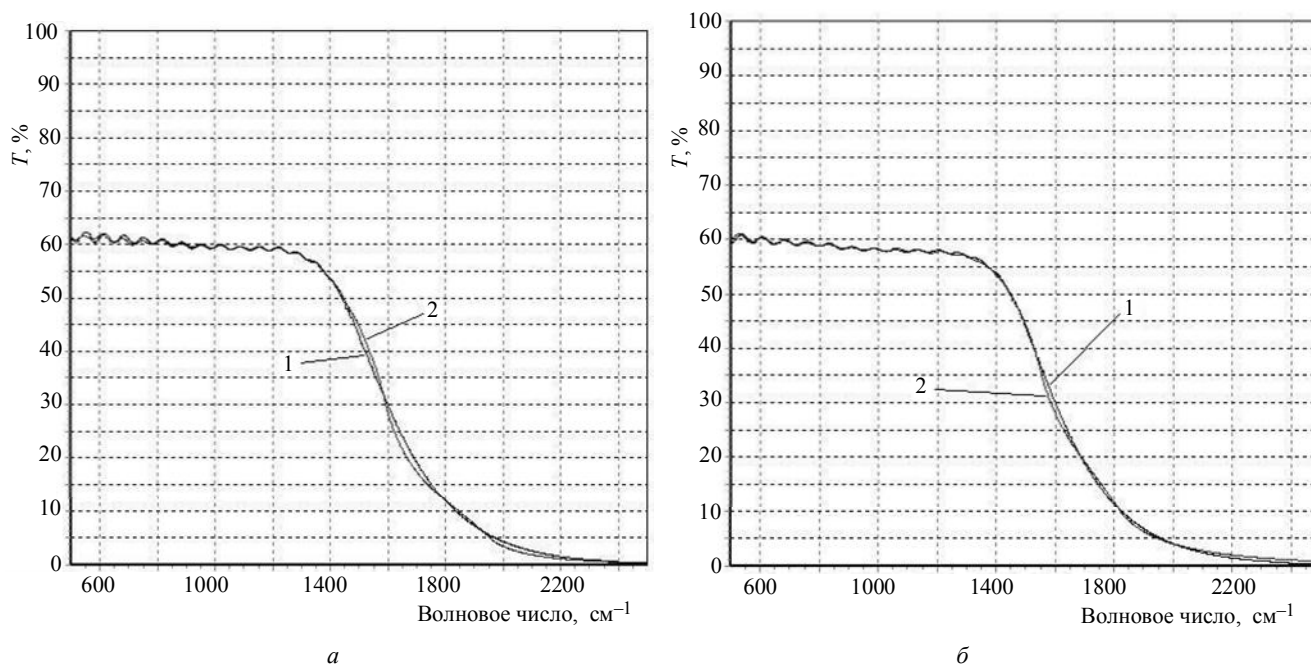


Рис. 5. Спектр пропускания образца T208_3_T_1 (а) и T209_5_T_1 (б): 1 — экспериментальный спектр пропускания; 2 — результат моделирования

Таблица 3

Параметр		Спектр T208_3_T_1		Спектр T209_5_T_1	
		Паспортные данные	Результаты расчета	Паспортные данные	Результаты расчета
Верхний варизонный слой	Толщина, мкм	1,00±0,20	0,9716	0,50±0,30	0,4502
	Состав, х	0,200	0,2045	0,200	0,2066
Первый рабочий слой	Толщина, мкм	6,10	6,1373	5,00	5,0873
	Состав, х	0,220	0,2227	0,220	0,2185
Второй рабочий слой	Толщина, мкм	6,50	6,5424	5,20	5,1620
	Состав, х	0,260	0,2584	0,250	0,2447
Буферный слой	Толщина, мкм	7,70	7,7701	8,50	8,4787
Ошибка вычислений			0,53491 %		0,36628 %

Несоответствие наблюдается в коротковолновой области — отличаются характеры спада теоретического и экспериментального графиков. Можно предположить наличие тонких варизонных слоев, не указанных в паспорте. Полученное значение среднеквадратичного отклонения экспериментальных графиков от расчетных составляет порядка 0,3—0,5 %.

Заключение

Разработан метод определения характеристик многослойных полупроводниковых структур по спектрам ИК-пропускания. Метод позволяет оценить толщины и состав многослойных структур КРТ, предназначенных для многоспектральных матричных ИК-фотоприемников, по математической модели спектров ИК-пропускания. Построена теоретическая математическая модель спектра пропускания, зависящая от коэффициента поглощения эпитаксиальных слоев КРТ и ряда парамет-

ров: толщины, коэффициентов отражения и преломления для ЭС КРТ, основанная на матричном методе Абея.

Проведено моделирование спектров пропускания многослойных гетероэпитаксиальных структур, выращенных методами жидкофазной и молекулярно-лучевой эпитаксии, а также спектров пропускания двухспектральных структур, выращенных методом жидкофазной эпитаксии.

Литература

1. Бовина Л. А., Болтарь К. О., Бурлаков И. Д., Головин С. В., Иванов В. Ю., Сагинов Л. Д., Стафеев В. И., Акимов В. М., Климанов Е. А., Лакеенков В. М., Сидоров Ю. Г. // Прикладная физика. 1999. № 3. С. 32.
2. Акимов В. М., Бурлаков И. Д., Болтарь К. О., Климанов Е. А., Мансветов Н. Г., Пономаренко В. П., Сагинов Л. Д., Соляков В. Н., Стафеев В. И., Тимофеев А. А., Филачев А. М. // Там же. 2005. № 2. С. 7.
3. Болтарь К. О., Федирко В. А. // Тез. докл. V отраслевой конф. "Аналитические методы исследования материалов и изделий микроразэлектроники". — М.: ЦНИИ "Электроника", 1989. С. 169.

4. Уайт М. Г. Полупроводниковые формирователи сигналов изображения. Пер. с англ. / Под ред. Р. А. Суриса. — М.: Мир, 1979. Часть II.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики: Пер. с англ./Под ред. Г. П. Мотулевич. — М.: Наука, 1970.
6. Болтарь К. О., Яковлева Н. И., Каиуба А. С., Удалова А. Г. // Прикладная физика. 2008. № 1. С. 26.
7. Lubzens D., Rosenfeld D., Nemirovsky Y. T. // Infrared Phys. 1988. V. 28. No. 6. P. 417.
8. Бурдуков Ю. М., Гашимбаде Ф. М., Гольдберг Ю. А., Гореленок А. Т., Гуткин А. А., Емельяненко О. В., Именков А. Н., Кесаманлы Ф. П., Колчанова Н. М., Лагунова Т. С., Левинштейн М. Е., Негрескул В. В., Седов В. Е., Талалакин Г. Н., Уханов Ю. И. Арсенид галлия. Получение, свойства и применение. — М.: Наука, 1973.
9. Шматов Н. И., Смирнова Н. А., Белов А. Г., Оранский В. А., Шленский А. А. // Материалы электронной техники. 2006. № 3. С. 28.

IR transmission spectra of multilayer heteroepitaxial structures

K. O. Boltar, N. I. Yakovleva, A. V. Nikonov

Orion R&P Association, 46/2 Enthusiasts hay way, Moscow, 111123, Russia

E-mail: orion@orion-ir.ru

The IR transmission spectrum simulation based on the Abel matrix method has been developed to determine photosensitive layers characteristics. This mathematical model depends on the absorption coefficient α and a number of parameters, which characterize the properties of the substrate and HgCdTe HES layers. The model allows to calculate the HgCdTe initial photosensitive layers characteristics such as thicknesses of photosensitive and buffer layers d , and compositions of the photosensitive layers. The IR transmission spectra of MCT multilayer heteroepitaxial structures grown both LPE and MBE methods have been measured and investigated.

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

Keywords: IR transmission spectrum, CdHgTe, epitaxial layers, liquid-phase epitaxy, molecular beam epitaxy.

Bibliography — 9 references.

Received September 20, 2010