

УДК 621.383.4/5

Особенности спектральной зависимости поглощения эпитаксиальных структур CdHgTe

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

Проведены расчеты спектра поглощения полупроводникового соединения CdHgTe по теоретической модели, основанной на явлении собственного поглощения и общей теории прямых межзонных оптических переходов, принимая во внимание модель Кейна и выведенные из нее выражения энергии запрещенной зоны, квазиимпульса, края валентной зоны легких и тяжелых дырок. Исследованы спектры поглощения экспериментальных структур КРТ с эпитаксиальным слоем заданной толщины. Проведено сравнение измеренных и рассчитанных спектров поглощения структур КРТ.

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

Ключевые слова: полупроводник, коэффициент поглощения, КРТ, оптический переход.

Введение

Материал КРТ (CdHgTe) широко используется для изготовления современных фотоприемных устройств (ФПУ) с высокими фотоэлектрическими параметрами, которые работают во всей инфракрасной (ИК) области спектра: от коротковолнового (SWIR) до сверхдлинноволнового (VLWIR) [1–4] диапазонов. Для построения на выходе фотоприемного устройства бездефектного однородного изображения матрица фотодиодов на основе КРТ должна иметь распределение выходных характеристик (квантовой эффективности, темнового тока, обнаружительной способности), приближающееся к распределению Гаусса. Одним из основных факторов, ограничивающих выходные параметры ФПУ, является неоднородность коэффициента поглощения исходного материала HgCdTe по фоточувствительной структуре [5]. Зависимость коэффициента поглощения от энергии фотонов в области собственного поглощения определяет граничную длину волны и глубину поглощения эпитаксиального слоя CdHgTe [6].

С коэффициентом поглощения и толщиной рабочего эпитаксиального слоя тесно связан важный параметр качества, а именно, квантовая эффективность ФПУ, так как эффективная толщина поглощающего слоя определяет

количество сгенерированных пар носителей заряда и фототок $p-n$ -перехода. Для фотовольтаических приборов с планарными $p-n$ -переходами толщина поглощающего слоя обычно меньше, чем толщина рабочего эпитаксиального слоя и определяется суммой диффузионных длин неосновных носителей заряда и шириной области пространственного заряда. Поэтому для эффективной работы прибора, в идеале, толщина рабочего эпитаксиального слоя и теоретическое значение эффективной длины поглощения должны совпадать.

При изготовлении ФПУ с высоким значением квантовой эффективности желательно иметь тонкий поглощающий слой с граничной длиной волны, соответствующей коэффициенту поглощения $>10^3 \text{ см}^{-1}$.

В настоящее время существует большое количество различных аналитических моделей спектра поглощения, пропускания и отражения ГЭС КРТ [7–9]. Для построения адекватной модели важно, чтобы расчеты основывались как на основных физических законах, так и в результатах экспериментальных измерений.

В данной работе рассмотрены особенности моделирования спектра поглощения КРТ на основе анализа фундаментальных законов поглощения при межзонных переходах электронов из валентной зоны в зону проводимости, учитывая модель Кейна и выведенные из нее выражения энергии запрещенной зоны, квазиимпульса, края валентной зоны легких и тяжелых дырок. Модель спектра поглощения предназначена для проектирования фоточувствительных приборов на основе ГЭС КРТ.

Аналитическая модель спектра поглощения

Зависимость коэффициента поглощения от энергии излучения $\alpha(\hbar\omega)$, падающего на фоточувствительный полупроводниковый слой, или длины волны $\alpha(\lambda)$ образует спектр поглощения, который можно выразить отношением поглощенных фотонов в единицу объема и времени к плотности энергетического потока [10]:

Яковлева Наталья Ивановна, зам. начальника НИЦ¹.

Болтарь Константин Олегович, начальник НТК¹, профессор².

Никонов Антон Викторович, инженер¹, аспирант².

Бункина Наталья Алексеевна, доцент³.

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

(государственный университет)

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

³Московский авиационный институт.

Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, 4.

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\hbar\omega \cdot W(\omega)}{U \cdot \left(\frac{c}{n}\right)}$$

где $W(\omega)$ – вероятность перехода электронов на частоте ω , $\hbar\omega$ – энергия кванта, U – плотность энергетического потока; c – скорость света, n – коэффициент преломления.

Допуская, что при низких температурах валентная зона полностью заполнена электронами, а зона проводимости пуста, суммируя по волновому вектору k все состояния электронов в единичном объеме валентной зоны и зоны проводимости, в том числе спин-орбитальные, можно получить вероятность переходов, вызванных поглощенными фотонами с частотой ω в единицу времени, которая определяется энергией, поглощенной в единичном объеме [11]:

$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \left(\frac{eA_0}{mc}\right)^2 \sum_{C,V} \int \frac{2dk^3}{(2\pi)^3} \left| \hat{A} \cdot M_{CV} \right|^2 \times \\ \times \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega],$$

где $\left| \hat{A} \cdot M_{CV}(k) \right|$ – матричный элемент оператора возмущения;

$$A(r,t) = A_0 \exp[i(q \cdot r - \omega t)]$$

Здесь $A(r,t)$ – вектор потенциала, A_0 – начальное значение, \hat{A} – единичный вектор, q – коэффициент, r – радиус-вектор, t – время, m – масса электрона, c – скорость света, e – заряд электрона, $E_C(k)$ – энергия зоны проводимости, $E_V(k)$ – энергия валентной зоны, δ – дельта-функция.

Плотность энергии можно описать формулой:

$$U = \frac{n^2 A_0^2 \omega^2}{2\pi c^2}.$$

Комбинируя выше приведенные уравнения, коэффициент поглощения α можно описать выражением:

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm^2 \omega} \sum_{C,V} \int \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} \left| \hat{A} \cdot M_{CV}(k) \right|^2 \times \\ \times \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega]$$

Здесь $\left| \hat{A} \cdot M_{CV}(k) \right|$ – матричный элемент запишем в более компактном виде как $|M_j|^2$, пространственный вектор k пропорционален $k \propto \frac{2\pi}{a}$, где a – характеристический параметр кристаллической решетки.

Оставшееся выражение представляет собой функцию плотности заполнения единичного объема при поглощении фотона с энергией $\hbar\omega$:

$$\rho_{CV}(k) \equiv \int \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega].$$

Окончательно уравнение для коэффициента поглощения записывается в виде:

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm^2 \omega} \sum_j |M_j|^2 \rho_{CV}(k).$$

Для расчета функции плотности $\rho_{CV}(k)$ заполнения единичного объема в единицу времени необходимо вычислить интеграл по поверхности в k -пространстве. При условии изотропности пространства, функция плотности находится из выражения:

$$\rho_{CV}(k) = \frac{k^2}{\pi^2} \cdot \left(\frac{\partial E_C}{\partial k} - \frac{\partial E_j}{\partial k} \right)^{-1},$$

где $E_C(k)$ – энергия зоны проводимости, E_j – энергия валентной зоны. Для тройного соединения CdHgTe валентная зона состоит из трех зон (зоны тяжелых дырок, зоны легких дырок и зоны возникшей в результате спин-орбитального расщепления), поэтому $j = 1, 2, 3$ – номер зоны.

Если энергия поглощенных фотонов больше энергии запрещенной зоны, т.е. $\hbar\omega \geq E_g$, можно предположить, что электроны, переходящие из валентной зоны в зону проводимости обладают некоторой дополнительной энергией:

$$E_C - E_V = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\gamma},$$

где m_γ – приведенная масса, для которой справедлива формула:

$$\frac{1}{m_\gamma} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}.$$

Для расчета спектра поглощения фоточувствительной структуры полупроводникового соединения CdHgTe необходимо обратиться к классическому представлению зонной диаграммы данного полупроводникового соединения. Модель зонной диаграммы КРТ в точке Γ ($k=0$) представлена на рис. 1.

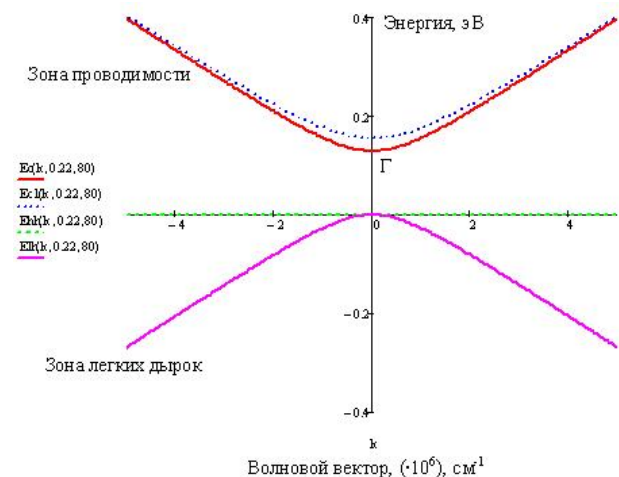


Рис. 1. Модель энергетической диаграммы КРТ в точке Γ ($k=0$).

При построении зонной диаграммы использована аппроксимация энергетических зависимостей параболическими функциями, которые хорошо согласуются с моделью Кейна. В рамках представленной аналитической модели энергия зоны проводимости описывается уравнением

$$E_C(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \left(E_g + \sqrt{E_g^2 + \frac{8k^2 P^2}{3}} \right).$$

Энергия зоны проводимости $E_c(k)$ представлена на рис. 1 сплошной линией, рядом пунктиром показано асимптотическое приближение $E_{C1}(k)$, рассчитанное по формуле

$$E_{C1}(k) = \frac{1}{2}E_g + \sqrt{\frac{1}{2}E_g^2 + \frac{3k^2P^2}{3}},$$

взятой из работы [12]. Это приближение часто используется при расчетах.

Валентная зона состоит из двух подзон, соединенных в точке при $k = 0$ – зоны тяжелых дырок $E_{hh}(k)$ (кривизна данной функции при выбранном масштабе мала) и зоны легких дырок $E_{lh}(k)$. Энергия валентных зон описываются уравнениями:

$$E_{hh}(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}},$$

$$E_{lh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \left(E_g - \sqrt{E_g^2 + \frac{8k^2P^2}{3}} \right).$$

Отдельная зона, возникающая вследствие спин-орбитального взаимодействия (на рис. 1 не показана) может быть представлена формулой:

$$E_{SO}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)}.$$

Вывод окончательной формулы коэффициента поглощения опирается на представленные энергетические зависимости $E_c(k)$, $E_{hh}(k)$, $E_{lh}(k)$. Матричный элемент Кейна, входящий в уравнение коэффициента поглощения, можно аппроксимировать выражениями:

$$|M_j(0)|^2 = \frac{2m^2 P^2}{3\hbar^2},$$

$$|M_j(k)|^2 = \frac{2m^2 P^2}{3\hbar^2} \times \left[(a_c c_j + c_c a_j)^2 + (a_c b_j + b_c a_j)^2 \right]$$

при $k = 0$ и $k \neq 0$, где a , b , c – коэффициенты, которые учитывают особенности математической модели приближения и спин-орбитальное расщепление. Для коэффициентов выполняется нормировочное уравнение $a_j^2 + b_j^2 + c_j^2 = 1$.

Сумма квадратов a , b , c , $T_{cj} = [(a_c c_j + c_c a_j)^2 + (a_c b_j + b_c a_j)^2]^2$, входящая в формулу матричного элемента, выражается через параметры зонной диаграммы следующим образом:

$$T_{c-hh}^2 = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{8}{3} \cdot \frac{P^2 k^2}{E_g^2} \right)^{1/2} + 1 \right] = \frac{\hbar\omega}{2\hbar\omega - E_g}$$

$$T_{c-lh}^2 = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{E_g}{\hbar\omega} \right)^2$$

Волновые векторы k_1 и k_2 при условии поглощения кванта энергии и перехода электрона из валентной

зоны (зоны легких или тяжелых дырок) в зону проводимости вычисляются из уравнений

$$\hbar\omega = E_c(k_1) - E_{hh}(k_1)$$

$$\hbar\omega = E_c(k_2) - E_{hh}(k_2)$$

и составляют

$$k_1 = \frac{1}{P} \sqrt{\frac{3}{2} \hbar\omega (\hbar\omega - E_g)},$$

$$k_2 = \frac{1}{P} \sqrt{\frac{3}{2} (\hbar^2 \omega^2 - E_g^2)}.$$

Таким образом, проведя дифференцирование $\left(\frac{\partial E_c}{\partial k} - \frac{\partial E_j}{\partial k} \right)$ по волновому вектору, можно вычислить плотности состояний в единице объема в единицу времени $\rho_{CV}(k)$, и затем, подставив значения k_1 , k_2 , T_{cj} , можно рассчитать коэффициенты поглощения при переходе электронов из зоны тяжелых или легких дырок в зону проводимости по формулам:

$$\alpha_{c-hh}(\hbar\omega) = \frac{\sqrt{3/2}}{137 \cdot n} \cdot \frac{1}{P} \times \frac{\sqrt{\hbar\omega} \cdot \sqrt{\hbar\omega - E_g}}{1 + \frac{m_C^*}{m} \left(1 + \frac{m_C^*}{m} \right) \cdot \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1 \right)},$$

$$\alpha_{c-lh}(\hbar\omega) = \frac{1}{137 \cdot \sqrt{6} \cdot n} \cdot \frac{1}{4P} \times \left[1 + 2 \left(\frac{E_g}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_g^2}.$$

Полный коэффициент поглощения складывается из суммы коэффициентов поглощения фотонов при переходе электронов из зон легких и тяжелых дырок.

$$\alpha_\Sigma = \alpha_{hh} + \alpha_{lh}$$

На рис. 2 представлены результаты моделирования коэффициентов поглощения $\alpha_{c-hh}(\hbar\omega)$ и $\alpha_{c-lh}(\hbar\omega)$ при переходе носителей заряда из зон легких и тяжелых дырок в зону проводимости для материала КРТ различного состава при температуре $T = 80$ К.

Суммарный коэффициент поглощения, который складывается из суммы $\alpha = \alpha_{hh} + \alpha_{lh}$, представлен на рис. 3 для материала КРТ состава $x = 0,22$ при температуре $T = 80$ К.

Экспериментальные исследования

Апробация аналитической модели спектра поглощения была проведена на однослойных эпитаксиальных структурах КРТ, выращенных методом жидкофазной эпитаксии. Архитектура тестовых образцов представлена на рис. 4. Образец состоял из оптически прозрачной подложки кадмий-цинк-теллур (CdZnTe), буферного слоя

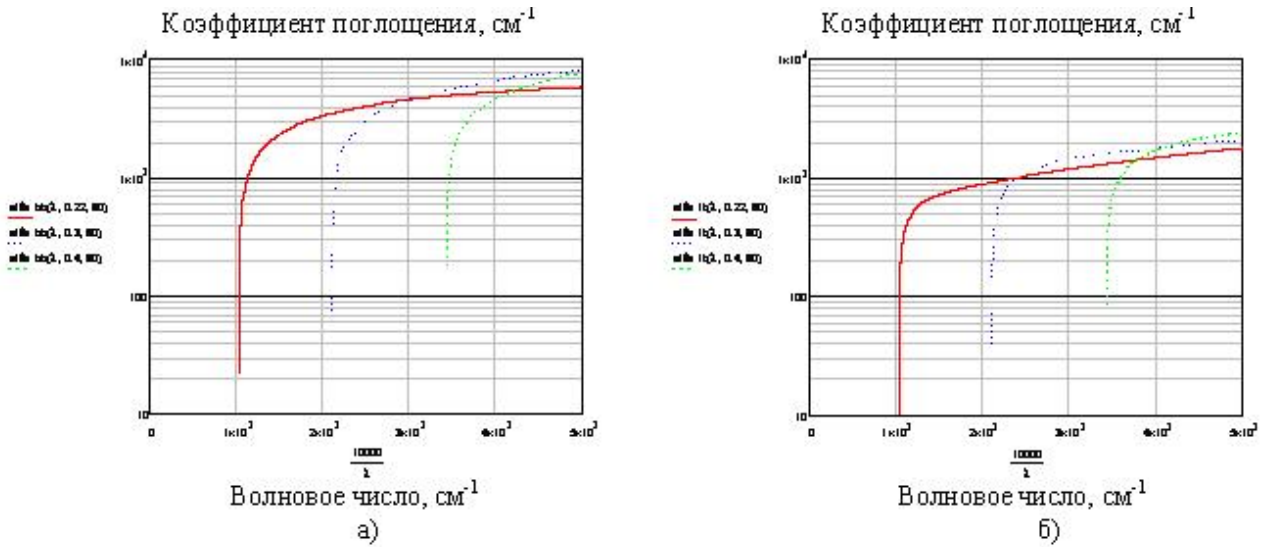


Рис. 2. Результаты моделирования коэффициентов поглощения $\alpha_{c-hh}(\hbar\omega)$ и $\alpha_{c-lh}(\hbar\omega)$ для материала КРТ различного состава при температуре $T = 80\text{ K}$: а) – $\alpha_{c-hh}(\hbar\omega)$ и б) – $\alpha_{c-lh}(\hbar\omega)$

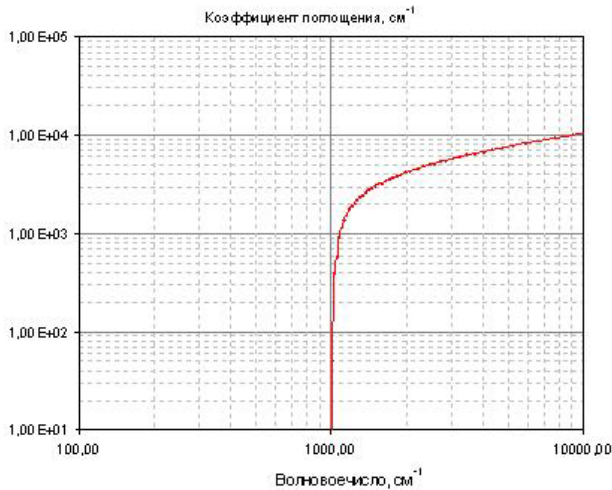


Рис. 3. Суммарный коэффициент поглощения КРТ состава $x=0,22$ при температуре $T = 80\text{ K}$

и поглощающего слоя CdHgTe p -типа проводимости. Толщина эпитаксиального слоя образцов составляла 8–16 мкм.



Рис. 4. Архитектура тестовых образцов

Спектры пропускания, экспериментальные и теоретические характеристики спектров поглощения тестовых образцов представлены на рис/ 5. Спектры пропускания тестовых структур, представленные слева, были измерены с помощью Фурье-спектрометра Vertex-70 фирмы Bruker в диапазоне длин волн, соответствующих волновым числам 2500–500 cm^{-1} . Образцы имели состав, соответствующий спектральному диапазону 8–12 мкм. В процессе исследований вычислялись граничная длина волны, состав и ширина запрещенной зоны фоточувствительного слоя КРТ p -типа проводимости.

Из рис. 5 видно, что теоретическая модель спектра поглощения хорошо соответствует экспериментальным данным, особенно в области спада характеристик. Имеется небольшое расхождение по углу наклона. Расхождение теоретической модели и экспериментальных зависимостей в верхней области графиков объясняется локальной неоднородностью состава структуры.

Таким образом, данные расчетов свидетельствуют о том, что классическая модель коэффициента поглощения имеет хорошее соответствие с экспериментальными результатами и более ранними результатами моделирования.

Заключение

Для изготовления фотоэлектронных устройств нового поколения с заданными свойствами и высокими фотоэлектрическими параметрами необходимо проведение исследований оптических характеристик многослойных наногетероструктур полупроводникового соединения кадмий-ртуть-теллур (КРТ) для достижения максимального значения квантовой эффективности, которая напрямую зависит от коэффициента поглощения.

Для исследования оптических характеристик многослойных ГЭС КРТ построена зонная диаграмма тройных растворов КРТ, основанная на классической зонной модели Кейна и аппроксимации основных

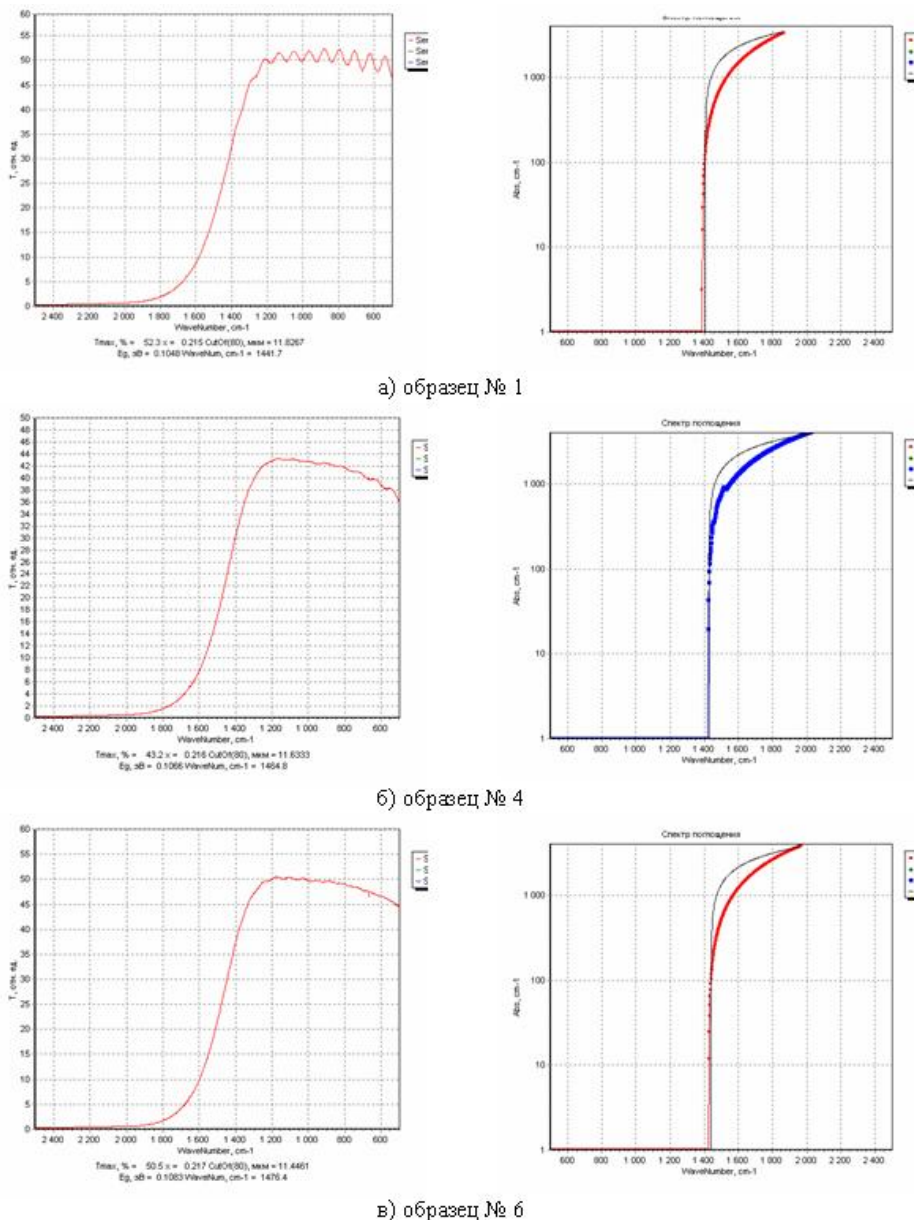


Рис. 5. Спектры пропускания (слева) и спектры поглощения (справа) тестовых образцов КРТ (теоретическая характеристика представлена сплошной линией, экспериментальная зависимость представлена точками)

энергетических зависимостей параболическими функциями. Проведен расчет спектров поглощения тестовых образцов и сравнение полученных результатов с теоретической моделью, основанный на анализе фундаментальных законов поглощения при межзонных переходах электронов из валентной зоны в зону проводимости. Построенные аналитические модели используются для расчетов спектров пропускания и отражения многослойных гетероэпитаксиальных структур КРТ.

Литература

1. Бурлаков И.Д., Пономаренко В.П., Филачев А.М. и др. // Прикладная физика. 2007. № 2. С. 43
2. Boltar K.O., Burlakov I.D., Filachev A.M., et al. // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). 2007. V. 16. No. 4. P. 234.

3. Boltar K.O., Burlakov I.D., Ponomarenko V.P., et al. // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). 2008. V. 17. No. 1. P. 9.
4. Kinch M. A. // J. Electron. Mater. 2000. V. 29. P. 809.
5. Phillips J.D., Moazzami K., and Kim J. // Appl. Phys. Lett. V. No. 18. P. 3701.
6. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Физические основы. – М.: Физматкнига, 2005.
7. Никонов А.В., Болтарь К.О., Яковлева Н.И. // Успехи прикладной физики. 2013. Т. 1. № 4. С. 500
8. Moazzami K., Phillips J., Lee D., et al. // Journal of Electronic Materials. 2005. V. 34. No. 6. P. 773.
9. Anirban Neogi, Manali Dhar // International Journal of Science, Engineering and Technology Research (IJSETR). 2013. V. 2. Issue 8. P. 1616.
10. Junhao Chu, Arden Sher, Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors, Springer Science+Business Media, LLC, 2008.
11. Bassani F, Parravicini G.P. Electronic States and Optical Transitions in Solid. Pergamon Press, Oxford, 1975.
12. Finkman S.E. and Schacham S.E. // J. Appl. Phys. 1984. V. 56. P. 2896.

SWIR ADP FPAs based on InGaAs heterostructures

N. I. Iakovleva¹, K. O. Boltar^{1,2}, A. V. Nikonov^{1,2}, and N. A. Bunkina³

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

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

³Moscow Aviation Institute
4 Volokolamskoe shosse, Moscow, 125993, Russia

Received June 20, 2014

The features of HgCdTe material absorption spectra have been analyzed relating to the particular nature of their electronic band structures and Kane model and investigated on the basis of the fundamental absorption edge caused by transitions of electrons from the valence band to the conduction band. The HgCdTe absorption spectra of photosensitive p-type structures with given thickness have been calculated as a function of wavelength. Measured data were compared with theoretical model for studying and characterizing HgCdTe properties.

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

Keywords: semiconductor, absorption factor, HgCdTe, optical transition.

References

1. I. D. Burlakov, V. P. Ponomarenko, A. M. Filachev, et al., *Prikladnaya Fizika*, No. 2, 43 (2007).
2. K. O. Boltar, I. D. Burlakov, A. M. Filachev, et al., *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)*. **16**, 234 (2007).
3. K. O. Boltar, I. D. Burlakov, V. P. Ponomarenko, et al., *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)*. **17**, 9 (2008).
4. M. A. Kinch, *J. Electron. Mater.* **29**, 809 (2000).
5. J. D. Phillips, K. Moazzami, and J. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3701.
6. A. M. Filachev, I. I. Taubkin, and M. A. Trishenkov, *Solid-State Photoelectronics. Physical Base*. (Fizmatkniga, Moscow, 2005) [in Russian].
7. A. V. Nikonov, K. O. Boltar, and N. I. Iakovleva, *Uspekhi Prikladnoi Fiziki*, **1**, 500 (2013).
8. K. Moazzami, J. Phillips, D. Lee, et al., *Journal of Electronic Materials*. **34**, 773 (2005).
9. Anirban Neogi and Manali Dhar, *International Journal of Science, Engineering and Technology Research (IJSETR)* **2**, 1616 (2013).
10. Junhao Chu and Arden Sher, *Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors*, (Springer Science+Business Media, LLC, 2008).
11. F. Bassani and G. P. Parravicini, *Electronic States and Optical Transitions in Solid*. (Pergamon Press, Oxford, 1975).
12. S. E. Funkman and S. E. Schcham, *J. Appl. Phys.* **6**, 2896 (1984).