

УДК 621.384.3/5

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp,
85.60.Dw, 42.25.Gy, 78.20.Ci

Анализ многослойных гетероэпитаксиальных структур на основе CdHgTe по спектрам ИК-пропускания

А. В. Никонов, Н. И. Яковлева

Проведено исследование спектров пропускания многослойных гетероэпитаксиальных структур на основе тройных твердых растворов кадмий-ртуть-теллур. Реализована модель расчета характеристик эпитаксиальных слоев, входящих в состав сложной многослойной гетероэпитаксиальной структуры, из экспериментального спектра пропускания. Для вычисления параметров слоев реализован метод пакетного градиентного спуска. Проведен расчет параметров образцов гетероэпитаксиальных структур, выращенных методами жидкофазной и молекулярно-лучевой эпитаксии: определены толщины рабочих фоточувствительных слоев с погрешностью не более 0,1 мкм и состав КРТ с погрешностью не более 1 %. Разработанные модели показывают эффективность для экспресс-контроля оптических характеристик образцов полупроводниковых структур.

Ключевые слова: спектр пропускания, многослойная структура, CdHgTe, матричный метод, градиентный спуск, оптические характеристики.

Введение

Современные оптико-электронные системы двойного назначения предъявляют повышенные требования к характеристикам матричных фотоприемных устройств (МФПУ) 2- и 3-го поколения на основе фоточувствительных материалов, чувствительных в ИК-диапазоне [1, 2]. Лидирующие позиции в технологии изготовления ИК МФПУ занимает тройное соединение кадмий-ртуть-теллур (КРТ) [3]. Актуальной задачей у разработчиков фотоприемных устройств на основе КРТ является контроль состава и толщины рабочих фоточувствительных слоев, входящих в такие структуры, с повышенной точностью.

Данная работа посвящена анализу и обработке спектров пропускания сложных многослойных гетероэпитаксиальных структур (ГЭС) на ос-

нове КРТ различного типа с последующим вычислением составов и толщин эпитаксиальных слоев.

Модель расчета спектра ИК-пропускания

Классическими инструментами измерения состава и толщин эпитаксиальных слоев КРТ являются методики, основанные на измерении спектров пропускания полупроводниковых структур, состоящих из одного-двух слоев [4], и последующего расчета толщин эпитаксиальных слоев по количеству наблюдаемых интерференционных экстремумов [5], а также Фурье-анализу интерференционной картины спектра пропускания [6]. В современных ГЭС твердых растворов КРТ присутствуют буферные, варизонные слои и рабочие фоточувствительные слои различного состава, поэтому становится необходимым использовать сложные математические модели, учитывающие свойства всех перечисленных слоев. Для описанных многослойных структур свою эффективность показывает аналитическая модель расчета характеристик многослойных ГЭС КРТ по спектрам пропускания, описанная в работах [7–9].

В рамках представленной модели многослойная структура описывается последовательностью слоев (с индексами от l до s) различного состава и толщины, нанесенных на полубесконечную подложку (рис. 1). Из соотношения между падающим, отраженным и прошедшим излучениями:

Никонов Антон Викторович^{1,2}, начальник НИЦ, зам. зав. кафедрой, к.ф.-м.н.

Яковлева Наталья Ивановна¹, главный научный сотрудник, к.т.н.

¹ АО «НПО «Орион».

Россия, 111538, Москва, ул. Косинская, 9.
Тел. (499) 374-81-30. E-mail: orion@orion-ir.ru

² Московский физико-технический институт (государственный университет).

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

Статья поступила в редакцию 26 сентября 2017 г.

© Никонов А. В., Яковлева Н. И., 2017

$$\begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} s+1 \\ \prod_{j=1} t_j \end{bmatrix}^{-1} \times \begin{bmatrix} s \\ \prod_{j=1} M_j \end{bmatrix} \times \begin{vmatrix} 1 & r_{s+1} \\ r_{s+1} & 1 \end{vmatrix} \times \begin{pmatrix} E_{s+1}^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

рассчитывается коэффициент пропускания для заданной длины волны.

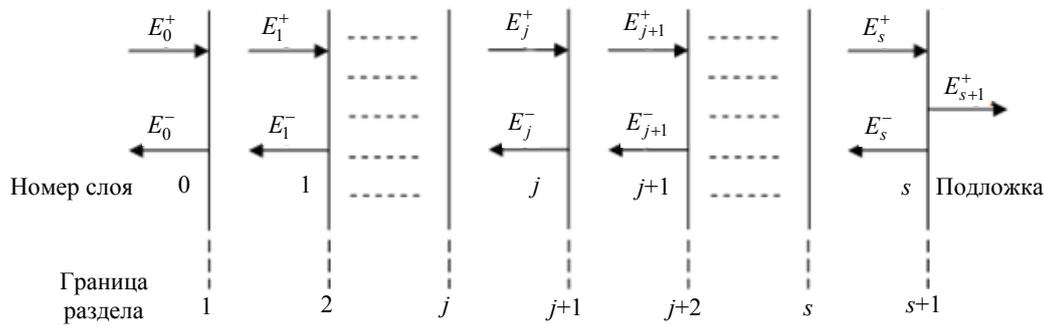


Рис. 1. Последовательность слоев в многослойной гетероэпитаксиальной структуре.

Потери излучения при прохождении границ раздела между слоями различного состава описываются посредством коэффициентов Френеля:

$$r_j = \frac{N_j - N_{j-1}}{N_j + N_{j-1}}; \quad t_j = \frac{2N_j}{N_j + N_{j-1}}.$$

Кроме того, поглощение в каждом слое описывается характеристической матрицей:

$$M_j = \begin{vmatrix} \exp(i\delta_j) & r_j \exp(-i\delta_j) \\ r_j \exp(i\delta_j) & \exp(-i\delta_j) \end{vmatrix},$$

зависящей от оптического пути через соответствующий слой:

$$\delta_j = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) N_j d_j = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) (n_j - ik_j) d_j,$$

где учитывается комплексный показатель преломления $N_j = n_j - ik_j$ [8]. Коэффициент экстинкции, являющийся мнимой частью комплексного показателя преломления, связан с коэффициентом поглощения КРТ следующим соотношением:

$$\alpha_j(\lambda) = \frac{4\pi k_j}{\lambda}.$$

При этом в расчетах помимо поглощения в слоях принимается также во внимание поглощение в подложке:

$$M_{s+1} = \begin{vmatrix} 1 & r_{s+1} \\ r_{s+1} & 1 \end{vmatrix}.$$

Посредством решения матричного уравнения вычисляется коэффициент пропускания на заданной длине волны:

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

Решая уравнение (1) относительно используемого набора волновых чисел, мы получаем спектр пропускания многослойной структуры с заданным числом слоев, их толщинами и составами. Используемая модель позволяет решить как прямую задачу, а именно, по известным значениям параметров слоев спрогнозировать спектр пропускания ГЭС КРТ, так и обратную задачу по вычислению параметров слоев, входящих в состав сложных структур, исходя из спектров пропускания методом пакетного градиентного спуска.

Метод пакетного градиентного спуска

В рамках реализованной модели спектр пропускания многослойной ГЭС КРТ представлял собой функцию, зависящую от ряда параметров, характеризующих характеристики эпитаксиальных слоев, входящих в состав сложной структуры:

$$T_j = T_j(v, d_1 \dots d_N, x_1 \dots x_N).$$

При реализации метода пакетного градиентного спуска [10], функционал отклонения расчетного спектра пропускания от экспериментального можно записать в виде:

$$\Delta T_j(v, d_1 \dots d_N, x_1 \dots x_N) = \sqrt{\sum_{k=1}^K (T_{\text{эксп}}(v_k) - T_{\text{расч}}(v, d_1 \dots d_N, x_1 \dots x_N))^2 / K},$$

где K – количество усреднений, причем функционал достигает минимума при истинных значениях этих параметров. Путем минимизации функционала ΔT_j можно рассчитать характеристику спектра пропускания, наиболее близкую к экспериментальной, и уточнить параметры исходной ГЭС КРТ.

Особенностью пакетного градиентного спуска является выбор точки локального минимума из общего числа стационарных точек. При каждой итерации параметр P_i ($P_i = d_1 \dots d_N, x_1 \dots x_N$) получает приращение $\pm \Delta P_i$, характеризующее скорость изменения функционала, умноженную на нормировочный коэффициент – скорость сходимости ψ_i . Для фиксации скорости сходимости используется алгоритм адаптации, так как устанавливаются значимые требования к данной переменной. Величина ψ_i должна быть достаточно мала, чтобы аппроксимация функционала была достаточно точной; в то же время ψ_i не должна быть слишком малой величиной, чтобы изменение P_i проходило не слишком малыми шагами. Таким образом, стационарными точками процесса построения минимизирующей последовательности являются только точки локального минимума функционала ΔT_j .

Разработанная модель позволяет учитывать следующие параметры:

- количество слоев в ГЭС, включая буферные и варизонные слои;
- состав x фоточувствительного материала $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ в каждом слое;
- толщину d каждого эпитаксиального слоя;
- неоднородность состава по толщине слоя;
- коэффициент поглощения каждого эпитаксиального слоя;
- коэффициент поглощения в подложке.

Расчет параметров ГЭС КРТ

В рамках данного исследования проведены измерение спектров пропускания и последующий расчет параметров многослойных ГЭС КРТ, выращенных методами молекулярно-лучевой и жидкофазной эпитаксии. Метод жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) является наиболее изученным технологическим процессом для роста слоев КРТ [11] и обычно применяется для производства матричных фотоприемников ИК-диапазона спектра

3–5 и 8–12 мкм. Основными недостатками ЖФЭ является невозможность точного контроля состава по глубине слоя и неровность поверхности эпитаксиального слоя, ухудшающая качество стыковки индиевыми столбиками МФЧЭ с кремниевой интегральной схемой (ИС) обработки сигнала. Технология молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) используется для производства новых поколений матричных ИК-фотоприемников [12]. Ростовые процессы МЛЭ осуществляются при низких температурах и позволяют получать гетероструктуры с точным контролем состава и уровнем легирования эпитаксиальных слоев. Особенности метода МЛЭ являются чрезвычайная чувствительность эпитаксиальных слоев к условиям роста, в частности, к температуре подложки и плотности потоков чистых материалов.

На рис. 2 представлено сравнение экспериментально измеренного и теоретически рассчитанного спектров пропускания многослойной ГЭС КРТ, выращенной методом МЛЭ на подложке GaAs с ориентацией (103). Из рисунка видно, что результирующий спектр пропускания представляет собой взаимное наложение интерференционных картин, возникающих в результате отражения от границ между слоями, а форма спектра зависит от соотношения толщин буферных и эпитаксиальных слоев. Резкое уменьшение коэффициента пропускания в коротковолновой области ИК-спектра объясняется поглощением в подложке. Максимальное значение пропускания приближается к 65 %.

В рамках предложенной модели проведен расчет параметров эпитаксиальных слоев, входящих в состав исследуемой ГЭС. В табл. 1 приведено сравнение паспортных данных на структуру, используемых в качестве пакета начальных данных в методе пакетного градиентного спуска, и уточненных значений параметров слоев, полученных в результате расчета. Представленные значения показывают высокую сходимость. Отличаются параметры варизонных слоев по составу: усредненный состав варизонных слоев более длинноволновый. Результат расчета толщин слоев соответствует паспортным данным. Пики модуляции совпадают по значениям волновых чисел. Несоответствие наблюдается в коротковолновой области: здесь теоретический график является более резким, что можно обосновать наличием тонкого дополнительного слоя, не указанного в паспорте на структуру.

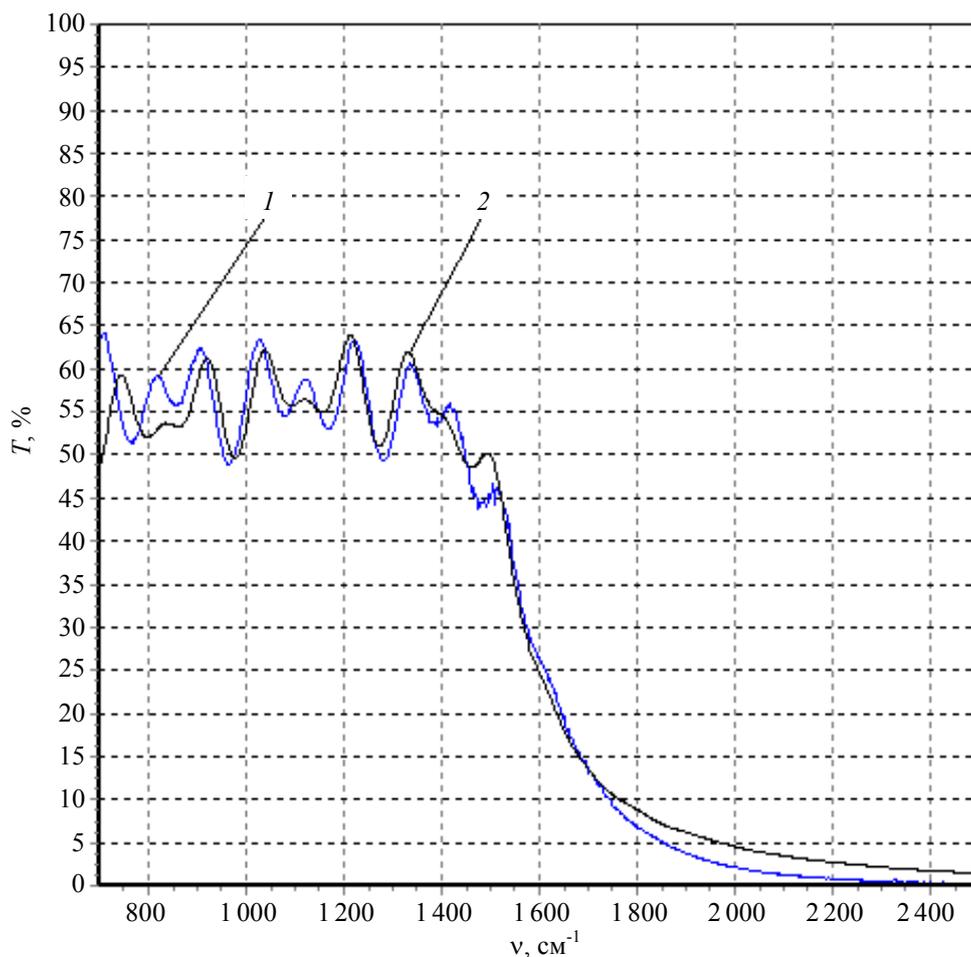


Рис. 2. Спектры пропускания T образца № KRT 050830(AG)(M)a (ГЭС КРТ МЛЭ). Кривая 1 – экспериментальный, 2 – расчетный.

Таблица 1

Структура ГЭС КРТ, выращенная методом МЛЭ

Параметр		Паспортные данные	Результаты расчета
Верхний варизонный слой	d , мкм	0,5	0,46
	x_{CdTe} , мол. дол.	0,3	0,27
Рабочий слой	d , мкм	7,5	8,69
	x_{CdTe} , мол. дол.	0,22	0,221
Нижний варизонный слой	d , мкм	1,9	2,03
	x_{CdTe} , мол. дол.	0,3	0,241
Буферный слой	d , мкм	6,3	5,93
СКО, %			0,903 %

Средний разброс состава по образцам ГЭС КРТ, полученных методом МЛЭ, составляет 0,002 мол. дол., что не превышает погрешности измерений. Совпадение измерений толщины ЭС КРТ по разработанной методике с паспортными данными также удовлетворительное. Для определения граничной длины волны фотодиодов, изготовленных из конкретной структуры ЭС КРТ, используется измеренное значение волнового числа ИК-пропускания по уровню 0,5.

Проведены исследования гетероэпитаксиальных структур, выращенных методом ЖФЭ. Жидкофазные эпитаксиальные слои $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ p -типа проводимости состава 0,2–0,3 мол. дол. диаметром 20–30 мм и толщиной 15–25 мкм выращивались на подложках $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ ($y = 0,02 \div 0,05$ мол. дол.) ориентации (111) путем принудительного охлаждения раствора-расплава на основе Te в интервале температур $510 \div 470$ °С. Состав эпитаксиальных слоев определялся по методике,

основанной на измерении спектров пропускания слоев в ближней инфракрасной области при 295 К. Совершенство кристаллической структуры слоев исследовалось металлографическими и рентгеновскими методами. Путем послойного травления тонких слоев материала изучалось распределение состава и электрофизических параметров по толщине эпитаксиального слоя. Полученные эпитаксиальные слои p -типа проводимости имели концентрацию дырок в диапазоне $7,0 \times 10^{15} \div 2,0 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и подвижность $400 \div 640 \text{ см}^2/(\text{В с})$ при 77 К. Разброс состава по площади составлял $0,002 \div 0,005$ мол. дол.

На рис. 3 приведено сравнение экспериментального и теоретически рассчитанного спектров пропускания ГЭС КРТ с двумя рабочими фоточувствительными слоями, чувствительных в диапазонах 3–5 и 8–12 мкм, выращенной методом ЖФЭ. За счет плавности границы перехода между фоточувствительными слоями спектральных диапазонов 3–5 и 8–12 мкм интерференционная картина имеет вид, схожий с результатами для однослойной структуры. В табл. 2 приведена сводная информация по результатам сравнения заявленных в паспорте данных на структуру и уточненных по результатам расчета значений толщин и состава эпитаксиальных слоев.

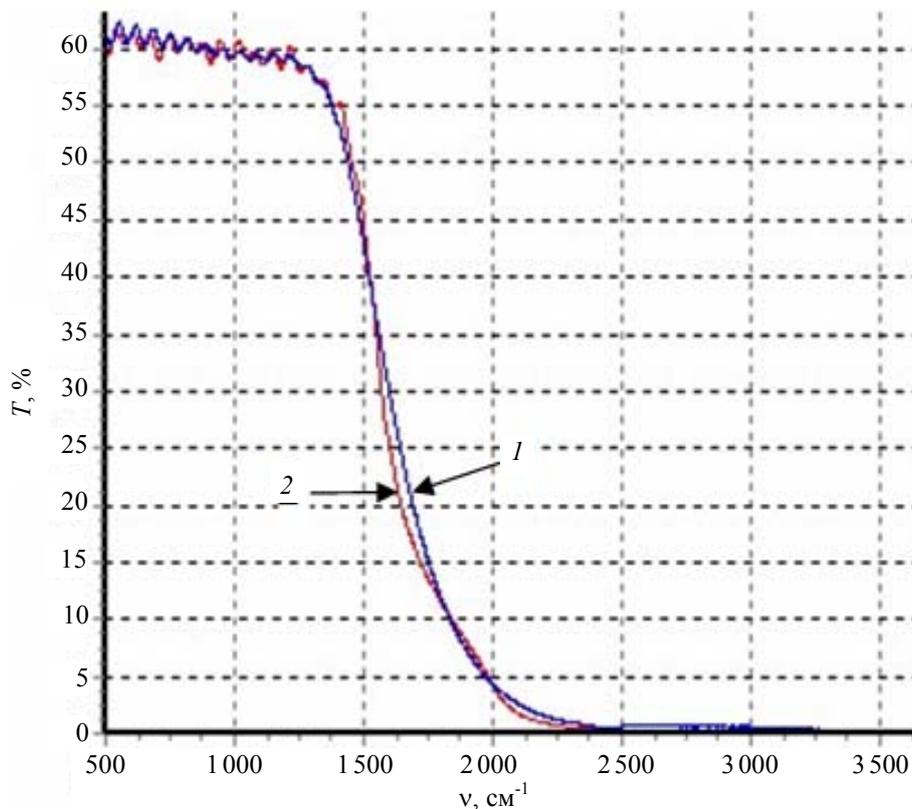


Рис. 3. Спектры пропускания T образца № T208-4 (ГЭС КРТ ЖФЭ). Кривая 1 – экспериментальный, 2 – расчетный.

Таблица 2

Структура ГЭС КРТ, выращенная методом ЖФЭ

Паспортные данные				Результаты вычисления			
Слой	x	$d_{\text{пасп}}, \text{ мкм}$	$P, \text{ см}^{-3}$	$T_{\text{мах}}, \%$	x	$d_{\text{изм}}, \text{ мкм}$	$\lambda, \text{ мкм}$
LWIR	0,220	7	$1,8 \times 10^{16}$	63	0,219	7,15	10,44
MWIR	0,280	8	$1,0 \times 10^{16}$		0,265	8,33	5,3

Соответствие параметров, представленных в сертификатах на ГЭС КРТ и полученных в результате расчета методом пакетного градиентного спуска по матричной модели, удовлетворительное.

Отличие в основном касается параметров буферных слоев. Рассчитанные значения толщин соответствуют заявленным паспортным данным в пределах допустимых отклонений. Пики модуляции

совпадают по длинам волн. Небольшое несоответствие наблюдается в коротковолновой области: по результатам расчетов на поверхности структуры имеется не заявленный в паспорте на структуру тонкий дополнительный слой толщиной не более 0,5 мкм, состав которого является более длинноволновым. Различия абсолютных значений состава x по паспортным данным и по результатам исследований находятся в рамках погрешностей измерений. Двухспектральные ГЭС КРТ ЖФЭ такого типа показывают наибольшую эффективность в технологии изготовления ФПМ формата 4×288 элементов для спектральных диапазонов 3–5 и 8–12 мкм.

Заключение

Входной контроль спектров пропускания фоточувствительных материалов играет существенную роль в технологии изготовления современных матричных фотоприемных устройств: контролируя качество, в том числе оптические параметры, исходных соединений, разработчики ФПУ имеют возможность на начальных стадиях контролировать выходные характеристики МФПУ в целом.

Проведенное исследование позволило реализовать комплексную методику прогнозирования параметров многослойных ГЭС КРТ по спектрам ИК-пропускания, тем самым обеспечивая неразрушающий входной контроль ГЭС КРТ различных типов и содержащих в себе несколько фоточув-

ствительных слоев. В частности, определены толщины эпитаксиальных слоев с погрешностью не более 0,1 мкм и состав КРТ с погрешностью не более 1 %.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бурлаков И. Д., Дирочка А. И., Корнеева М. Д., Пономаренко В. П., Филачев А. М. // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 5. С. 509.
2. Стафеев В. И., Болтарь К. О., Бурлаков И. Д. и др. // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. № 10. С. 1257.
3. Songlin Yu. / Труды XXIV Международной научно-технической конференции по фотоэлектронике и приборам ночного видения (Москва, 2016). С. 9.
4. Белогорохов А. И., Белогорохова Л. И., Денисов И. А. и др. // Материалы электронной техники. 2003. № 2. С. 43.
5. Павлов Л. П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов. – М.: Высшая школа, 1987.
6. Болтарь К. О., Яковлева Н. И., Каиуба А. С., Удалова А. Г. // Прикладная физика. 2008. № 1. С. 26.
7. Болтарь К. О., Яковлева Н. И., Никонов А. В. // Прикладная физика. 2011. № 5. С. 100.
8. Никонов А. В., Болтарь К. О., Яковлева Н. И. // Успехи прикладной физики. 2013. Т. 1. № 4. С. 500.
9. Корнеева М. Д., Сало В. В., Никонов А. В., Болтарь К. О., Яковлева Н. И. // Прикладная физика. 2013. № 6. С. 48.
10. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. – М.: Мир, 1985.
11. Варавин В. С., Гутаковский А. К., Дворецкий С. А., Карташев В. А., Латышев А. В., Михайлов Н. Н., Придачин Д. Н., Ремесник В. Г., Рыхницкий С. В., Сабина И. В., Сидоров Ю. Г., Титов В. П., Швец В. А., Якушев М. В., Асеев А. Л. // Прикладная физика. 2002. № 6. С. 25.
12. Bovina L. A., Boltar K. O., Burlakov I. D., et al. // Proc. of SPIE. 1998. No. 3819. P. 9.

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp,
85.60.Dw, 42.25.Gy, 78.20.Ci

Analysis of CdHgTe multilayer heterostructures on the basis if IR transmission spectra

A. V. Nikonov^{1,2} and N. I. Iakovleva¹

¹ Orion R&P Association
9 Kosinskaya str., Moscow, 111538, Russia
E-mail: orion@orion-ir.ru

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

Received September 26, 2017

Research of transmission spectra of the MCT multilayer heteroepitaxial structures grown by molecular beam epitaxy and liquid phase epitaxy was made. In this study, spatial heterogeneity of photosensitive pixels in focal plane array was researched. The composition and thickness of MCT epitaxial layers in

multilayer structure were calculated from transmission spectra. The batch gradient descent method was used for calculation of characteristics. This calculation of characteristics of the structures was carried out with increased accuracy. The developed model enables us to calculate the thicknesses of the working photosensitive layers with an error of not more than 0.1 μm and the composition of MCT with an error of not more than 1 %. The developed models show efficiency for express control of the optical characteristics of semiconductor structures used in modern optoelectronic systems.

Keywords: transmission spectra, multilayer structure, CdHgTe, matrix method, gradient descent, optical parameters.

REFERENCES

1. I. D. Burlakov, A. I. Dirochka, M. D. Korneeva, et al., *Usp. Prikl. Fiz.* **2** (5), 509 (2014).
2. V. I. Stafeev, K. O. Boltar, I. D. Burlakov et al., *Semiconductors* **39** (10), 1257 (2005).
3. Yu. Songlin, in *Proc. XXIV International Scientific and Technical Conference on Photoelectronics and Night Vision Devices* (Moscow, 2016), p. 9.
4. A. I. Belogorokhov, L. I. Belogorokhova, I. A. Denisov, et al., *Materialy Elektron. Tekhniki* No. 2, 43 (2003).
5. L. P. Pavlov, *Methods for Measuring Parameters of Semiconductor Materials* (Vyshaja Shkola, Moscow, 1987) [in Russian].
6. K. O. Boltar, N. I. Iakovleva, A. S. Kashuba, and A. G. Udalova, *Prikl. Phys.*, No. 1, 26 (2008).
7. K. O. Boltar, N. I. Iakovleva, and A. V. Nikonov, *Prikl. Phys.*, No. 5, 100 (2011).
8. A. V. Nikonov, K. O. Boltar, and N. I. Iakovleva, *Usp. Prikl. Phys.* **1** (4), 500 (2013).
9. M. D. Korneeva, V. V. Salo, A. V. Nikonov et al., *Prikl. Phys.*, No. 6, 48 (2013).
10. F. Gill, Y. Murray, and M. Right, *Practical Optimization* (Mir, Moscow, 1985) [in Russian].
11. V. S. Varavin, A. K. Gutakovskii, S. A. Dvoretiskii, et al., *Prikl. Phys.*, No. 6, 25 (2002).
12. L. A. Bovina, K. O. Boltar, I. D. Burlakov, et al., *Proc. of SPIE* **3819**, 9 (1998).