

УДК 621.383.4/5  
EDN: JHIDPAPACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz,  
07.57.Kp, 85.60.Dw

## Эффективная ширина запрещенной зоны гетероэпитаксиальных структур CdHgTe, выращенных методами молекулярно-лучевой и жидкофазной эпитаксии

А. В. Никонов, К. О. Болтарь

*Разработана математическая модель ширины запрещенной зоны тройных твердых растворов кадмий-ртуть-теллур, выращиваемых методами молекулярно-лучевой и жидкофазной эпитаксии, по результатам анализа статистической выборки результатов контроля спектральных характеристик чувствительности фотодиодов, изготавливаемых в ГНЦ РФ АО «НПО «Орион». Проведено исследование температурной зависимости длинноволновой границы чувствительности фотоприемных устройств на основе структур КРТ, изготовленных методами МЛЭ и ЖФЭ, с использованием полученных формул эффективной ширины запрещенной зоны. Полученные результаты направлены на совершенствование технологии изготовления фотодиодов на основе КРТ.*

**Ключевые слова:** CdHgTe, длинноволновая граница спектральной чувствительности, ширина запрещенной зоны, молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ), жидкофазная эпитаксия (ЖФЭ).

DOI: 10.51368/1996-0948-2024-3-44-50

### Введение

Результаты контроля и анализа спектров пропускания эпитаксиальных структур на тройных твердых растворах теллурида кадмия-ртути (КРТ) [1] и спектральных характеристик фотодиодов на их основе [2] демонстрируют

видимые различия для одного и того же состава эпитаксиальных слоев  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , выращенных методами молекулярно-лучевой и жидкофазной эпитаксии. Такие различия обуславливаются особенностями технологических процессов эпитаксиального роста полупроводниковых структур, в том числе многослойных, и должны учитываться при проведении прецизионного межоперационного контроля в рамках технологии изготовления матричных фотоприемных устройств, чувствительных в инфракрасном спектральном диапазоне.

Одна из основных причин отличия спектральных характеристик фоточувствительных структур выращенных методами МЛЭ и ЖФЭ состоит в различиях распределения состава и вакансий ртути по толщине эпитаксиального слоя [3, 4] из-за различия методов выращивания (в методе ЖФЭ мольная доля теллурида кадмия довольно существенно уменьшается в ходе выращивания из растворов-расплавов на основе Te) [5].

**Никонов Антон Викторович**<sup>1,2</sup>, в.н.с., зам. зав. кафедрой, к.ф.-м.н.

E-mail: post@avnikonov.ru

**Болтарь Константин Олегович**<sup>1,2</sup>, нач. НТК, д.ф.-м.н., профессор.

<sup>1</sup> АО «НПО «Орион».

Россия, Москва, 111538, ул. Косинская, 9.

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет).

Россия, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 26.04.2024

После доработки 14.05.2024

Принята к публикации 20.05.2024

Шифр научной специальности: 1.3.11

© Никонов А. В., Болтарь К. О., 2024

В рамках данного исследования эмпирически получены расчетные формулы эффективных значений ширины запрещенной зоны КРТ, адаптированные под конкретный метод эпитаксиального роста. Исследование проводилось посредством анализа результатов измерений спектральных характеристик чувствительности фотомодулей на основе КРТ производства ГНЦ РФ АО «НПО «Орион».

### Расчетная модель

При смешивании двух бинарных растворов можно представить некоторую виртуальную аппроксимацию [6] зонной структуры HgCdTe, в которой имеется некоторое линейное изменение состава CdTe. Эмпирические выражения для вычисления энергии запрещенной зоны  $E_g(x, T)$  для HgCdTe приведены в

работах [7–9]. Для формирования расчетной модели эффективных значений ширины запрещенной зоны КРТ использована эмпирическая зависимость ширины запрещенной зоны  $E_g$  от состава  $x$  материала и рабочей температуры  $T$ , наиболее распространенная и применимая для характеристики КРТ [10]:

$$E_g = -0,303(1-x) + 1,606x - 0,132x(1-x) + \frac{6,3(1-x) - 3,25x - 5,92x(1-x)}{11(1-x) + 78,7x + T} \times 10^{-4} T^2. \quad (1)$$

Зависимость длинноволновой границы спектральной характеристики чувствительности фотодиодов на основе КРТ от состава соединения и рабочей температуры описывается как:

$$\lambda_{гр} = \left( -0,244(1-x) + 1,295x - 0,106x(1-x) + \frac{5,081(1-x) - 2,621x - 4,774x(1-x)}{11(1-x) + 78,7x + T} \times 10^{-4} T^2 \right)^{-1}. \quad (2)$$

В рамках исследования использована статистическая выборка по результатам измерения спектральных характеристик чувствительности 37 фотомодулей на основе структур КРТ, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), и 42 фотомодулей на основе структур, выращенных методом жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ), при рабочей

температуре 77 К. На рисунках 1 и 2 показано сравнение экспериментальных результатов с расчетной зависимостью длинноволновой границы чувствительности от состава КРТ. Для методов МЛЭ и ЖФЭ стандартное отклонение (СО) наборов экспериментальных значений от расчетной кривой составило 0,478 мкм и 0,582 мкм соответственно.

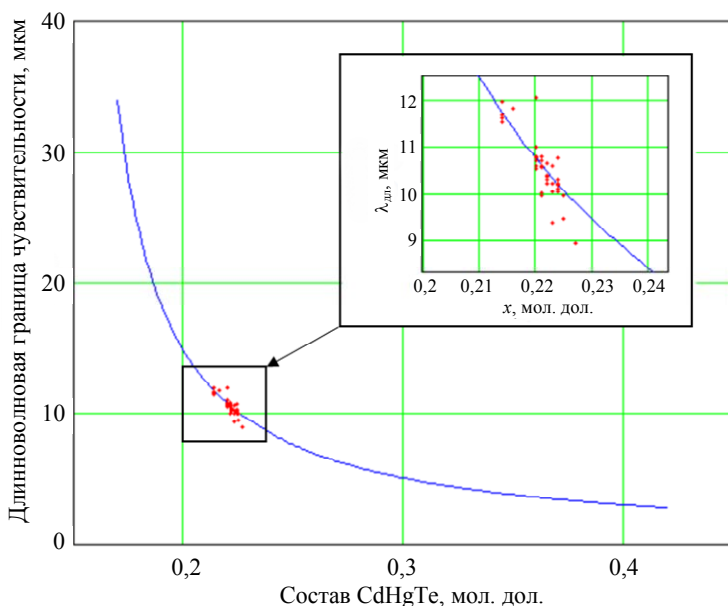


Рис. 1. Зависимость длинноволновой границы  $\lambda$  (мкм) спектральной характеристики чувствительности фотомодулей на основе структур  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , выращенных методом МЛЭ, от состава  $x$  (мол. дол.)

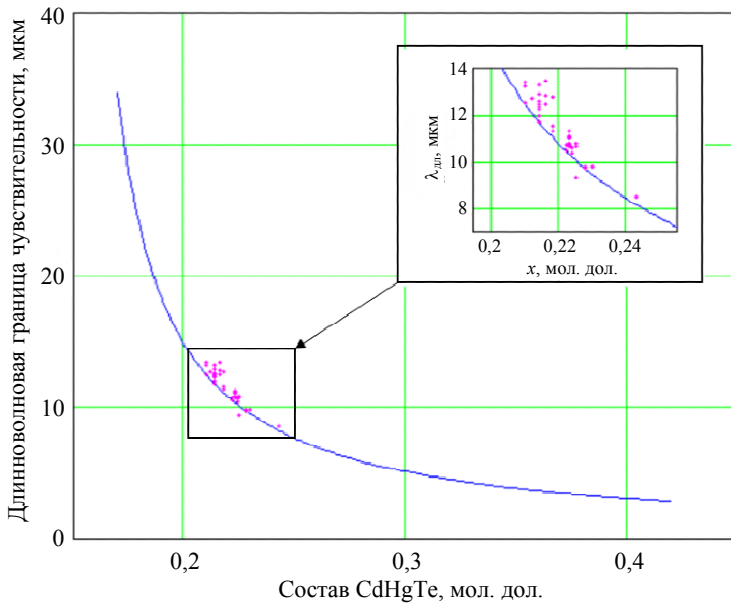


Рис. 2. Зависимость длинноволновой границы  $\lambda$  (мкм) спектральной характеристики чувствительности фотомодулей на основе структур  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ , выращенных методом ЖФЭ, от состава  $x$  (мол. дол.)

Для фотодиодов на основе структур КРТ, выращенных методом ЖФЭ, разброс значений длинноволновой границы чувствительности является более существенным по сравнению с фотодиодами на основе структур КРТ МЛЭ. Такие результаты связаны прежде всего с отличиями в технологических процессах эпитаксиального роста структур – метод МЛЭ по сравнению с ЖФЭ является более прецизионным в части формирования границ между слоями, способствующим уменьшению флуктуаций состава КРТ в эпитаксиальных слоях и уменьшению толщин гетеропереходов, что, в свою очередь, положительно сказывается на более контролируемом и резком

спаде чувствительности фотодиодов на основе КРТ на длинноволновой границе.

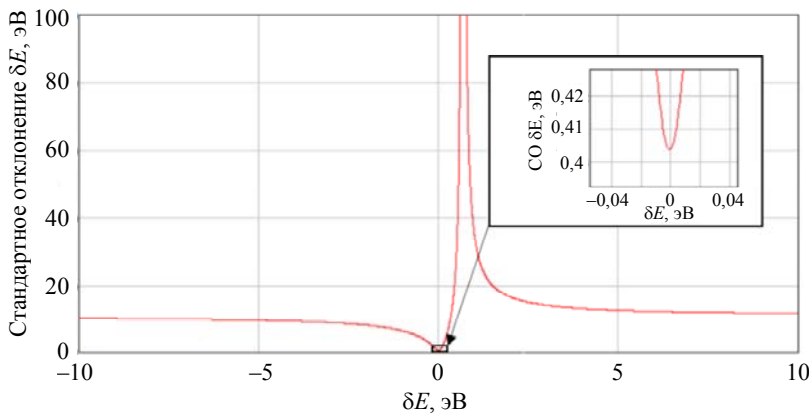
### Уточненные формулы ширины запрещенной зоны КРТ

В ходе исследования проведена модификация формулы (1) применительно к описанным выше экспериментальным выборкам: использован метод вариации числовых коэффициентов в расчетной формуле ширины запрещенной зоны КРТ. Для каждого компонента формулы (1) введены поправочные коэффициенты  $\delta E_1 \dots \delta E_6$ :

$$E_g = (-0,303 + \delta E_1)(1-x) + (1,606 + \delta E_2)x + (-0,132 + \delta E_3)x(1-x) + \frac{(6,3 + \delta E_4)(1-x) + (-3,25 + \delta E_5)x + (-5,92 + \delta E_6)x(1-x)}{11(1-x) + 78,7x + T} \times 10^{-4} T^2, \quad (3)$$

вариация которых методом пакетного градиентного спуска позволила минимизировать функционал отклонения расчетной зависимости от экспериментальных данных. На рисунке 3 в качестве примера показана зависимость

стандартного отклонения расчетной формулы и экспериментальных данных от значений одного из поправочных коэффициентов для фотомодулей на основе КРТ, изготовленных методом МЛЭ.



*Рис. 3. Зависимость стандартного отклонения расчетной формулы длинноволновой границы  $\lambda$  (мкм) спектральной характеристики чувствительности фотомодулей на основе структур  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , выращенных методом ЖФЭ, от состава  $x$  (мол. дол.)*

По результатам вариации числовых коэффициентов посредством определения минимумов функционала отклонения расчетной формулы от экспериментальных данных для обоих типов эпитаксии получены уточненные, эффективные формулы ширины запрещенной зоны КРТ.

Уточненная формула эффективной зависимости ширины запрещенной зоны КРТ от рабочей температуры и состава фоточувствительного слоя КРТ, выращенного методом МЛЭ, имеет вид:

$$E_g(x, T) = -0,298(1-x) + 1,607x - 0,135x(1-x) + \frac{6,294(1-x) - 3,247x - 5,916x(1-x)}{11(1-x) + 78,7x + T} \times 10^{-4} T^2.$$

Результирующее значение стандартного отклонения расчетной модели и экспериментальных данных для структур КРТ, выращенных методом МЛЭ, уменьшилось на 21,1 % относительно расчетов для базовой формулы (1) и составило 0,377 мкм.

Для фоточувствительных слоев КРТ, выращенных методом ЖФЭ, соответствующая эффективная формула ширины запрещенной зоны имеет вид:

$$E_g(x, T) = -0,307(1-x) + 1,605x - 0,131x(1-x) + \frac{6,302(1-x) - 3,254x - 5,922x(1-x)}{11(1-x) + 78,7x + T} \times 10^{-4} T^2.$$

Итоговое значение стандартного отклонения расчетной модели и экспериментальных данных для структур КРТ, выращенных методом ЖФЭ, составило 0,497 мкм, тем самым отклонение расчетного функционала от экспериментальных результатов уменьшилось на 14,6 %.

### Температурная зависимость длинноволновой границы чувствительности фотомодулей на основе КРТ

Для полученных эффективных зависимостей ширины запрещенной зоны соединения КРТ, выращиваемого различными эпитаксиальными методами, проведено исследование температурной зависимости длинноволновой границы чувствительности. На рисунках 4 и 5 показаны результаты сравнения зависимости границы чувствительности от рабочей температуры фотодиода для составов КРТ 0,2 и 0,3 мол. дол. соответственно. Как можно видеть из графиков на рисунке 4, для состава  $Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te$  при рабочей температуре 80 К расхождение значений длинноволновой границы чувствительности для различных типов эпитаксии может составлять до 1,3 мкм, а также использование структур КРТ, выращенных методом ЖФЭ, позволяет изготавливать фотодиоды, чувствительные в дальнем ИК-диапазоне. При повышении рабочей температуры до 100–150 К расхождение значений длинноволновой границы чувствительности уменьшается.

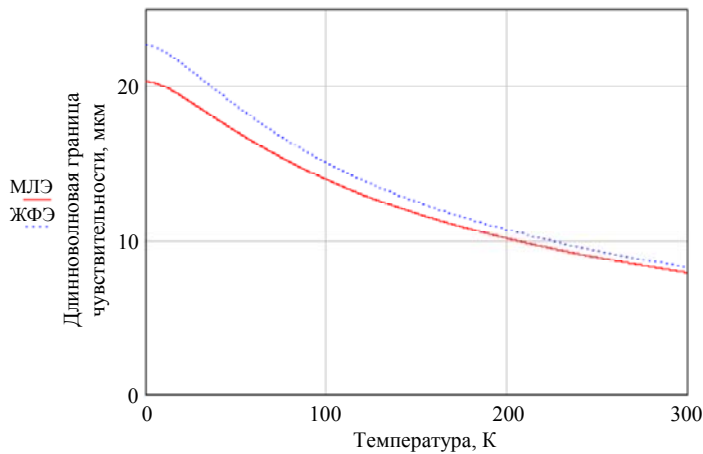


Рис. 4. Зависимость длинноволновой границы чувствительности фотодиодов на основе  $Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te$  от температуры

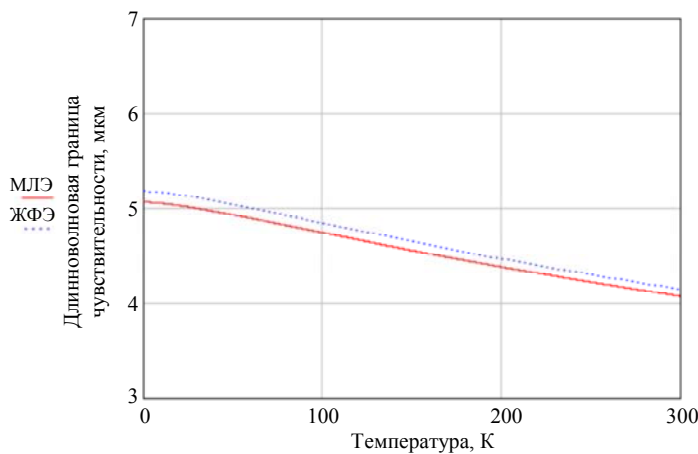


Рис. 5. Зависимость длинноволновой границы чувствительности фотодиодов на основе  $Cd_{0,3}Hg_{0,7}Te$  от температуры

Для соединения  $Cd_{0,3}Hg_{0,7}Te$  при понижении температуры до рабочих значений разность значений длинноволновой границы чувствительности для разных типов эпитаксии является не столь радикальной и не превышает 0,12 мкм (рис. 5), что коррелирует с предельно допустимой погрешностью при экспериментальных измерениях спектральных характеристик чувствительности.

Результаты анализа изменения наклона графика зависимости длинноволновой границы спектральной характеристики чувстви-

тельности от температуры при разных составах соединения КРТ показывают, что при больших молярных концентрациях наклон графиков как для метода МЛЭ, так и для метода ЖФЭ практически постоянен на всем отрезке температур. При уменьшении состава соединения при низких температурах наклон графика является более крутым, но по мере увеличения температуры наклон становится более пологим и практически не изменяет своей производной на оставшемся отрезке температур.

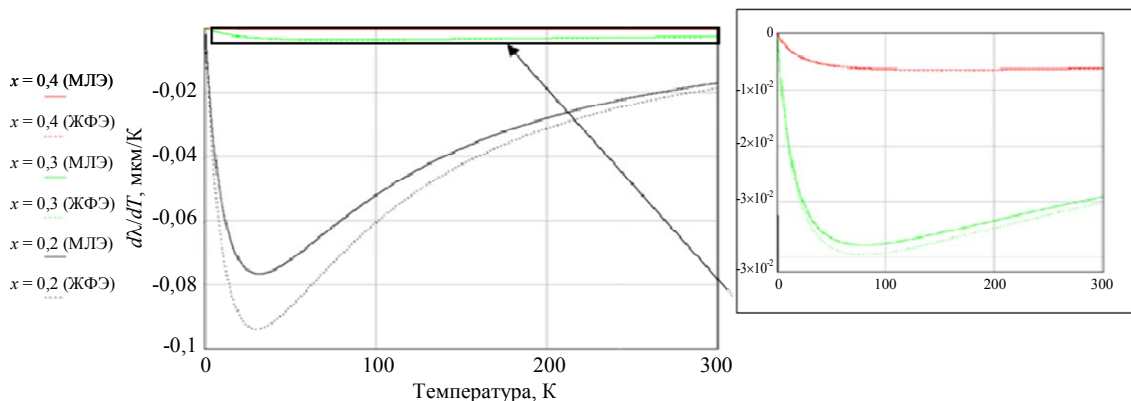


Рис. 6. Зависимость  $d\lambda_{гр}/dT$  для составов КРТ 0,2; 0,3; 0,4 мол. дол. для МЛЭ и ЖФЭ

**Заключение**

Разработанная модель расчета эффективной ширины запрещенной зоны твердых тройных растворов кадмий-ртуть-теллур позволяет с высокой точностью контролировать значения длинноволновой границы чувствительности фотомодулей на основе эпитаксиальных слоев КРТ, выращенных методами молекулярно-лучевой и жидкофазной эпитаксии. Применение расчетной модели в методиках входного контроля гетероэпитаксиальных структур на основе КРТ и межоперационного контроля фотодиодов на их основе будет способствовать эффективной селекции фоточувствительного материала, что положительно скажется на оптимизации производственного цикла и повышении сквозного процента выхода годных фотодиодов на основе КРТ, чувствительных в ИК-диапазоне.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Никонов А. В., Яковлева Н. И., Болтарь К. О. / Прикладная физика. 2011. № 5. С. 100–106.
2. Никонов А. В., Яковлева Н. И., Болтарь К. О. / Прикладная физика. 2012. № 3. С. 70–78.
3. Яковлева Н. И., Болтарь К. О. и др. / Прикладная физика. 2014. № 3. С. 61–66.
4. Никонов А. В., Яковлева Н. И. / Прикладная физика. 2017. № 5. С. 64–69.
5. Denisov I. A., Lakeenkov V. M. et al. / Proc. SPIE. 2000. Vol. 4340. P. 223–231.
6. Mooser E. Bonds and Bands in Semiconductors in book: *Crystalline Semiconducting Materials and Devices* / eds. Butcher P. N. et al. – New York: Springer Science+Business Media, 1986. P. 1–54.
7. Hansen G. L., Schmidt J. L., Casselman T. N. / J. Appl. Phys. 1982. Vol. 53. № 10. P. 7099.
8. *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds* / Ed. Capper P. – London: EMIS Data Reviews Series № 10, INSPEC, IEE, 1994.
9. *Narrow-Gap II-VI Compounds for Optoelectronic and Electromagnetic Applications* / Ed. Capper P. – London: Chapman & Hall, 1997.
10. Laurenti J. P., Camassel J. et al. / J. Appl. Phys. 1990. Vol. 67. № 10. P. 6454–6460.

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

**Heteroepitaxial CdHgTe structures with modeling effective band gap**

*A. V. Nikonov<sup>1,2</sup> and K. O. Boltar<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> Orion R&P Association, JSC  
9 Kosinskaya st., Moscow, 111538, Russia  
E-mail: post@avnikonov.ru

<sup>2</sup> Moscow Institute of Physics and Technology  
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia

Received 26.04.2024; revised 14.05.2024; accepted 20.05.2024

*An empirical approaching model of the band gap width of cadmium-mercury-tellurium solid alloys grown by molecular beam epitaxy and liquid phase epitaxy methods has been developed based on the statistical analysis of photoresponse characteristics measured by Fourier spectroscopy. The temperature dependences of the long-wavelength cutoff of MCT FPAs on the basis of grown by MBE and LPE structures have been investigated using the empirical approaching effective band gap models. The results are intended to improve the HgCdTe photodiode technology.*

*Keywords:* CdHgTe, cutoff, bandgap, molecular-beam epitaxy, liquid-phase epitaxy.

**REFERENCES**

1. Boltar K. O., Yakovleva N. I. and Nikonov A. V., *Applied Physics*, № 5, 100–106 (2011) [in Russian].
2. Nikonov A. V., Boltar K. O. and Yakovleva N. I., *Applied Physics*, № 3, 70–78 (2012) [in Russian].
3. Yakovleva N. I., Boltar K. O. et al., *Applied Physics*, № 3, 61–66 (2014) [in Russian].
4. Nikonov A. V. and Yakovleva N. I., *Applied Physics*, № 5, 64–69 (2017) [in Russian].
5. Denisov I. A., Lakeenkov V. M. et al., *Proc. SPIE* **4340**, 223–231 (2000).
6. Mooser E. Bonds and Bands in Semiconductors: in book *Crystalline Semiconducting Materials and Devices* / eds. Butcher P. N. et al. New York, Springer Science+Business Media, 1986, pp. 1–54.
7. Hansen G. L., Schmidt J. L. and Casselman T. N., *J. Appl. Phys.* **53** (10), 7099 (1982).
8. *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds* / Ed. Capper P. London, EMIS Data Reviews Series № 10, INSPEC, IEE, 1994.
9. *Narrow-Gap II-VI Compounds for Optoelectronic and Electromagnetic Applications* / Ed. Capper P. London, Chapman & Hall, 1997.
10. Laurenti J. P., Camassel J. et al., *J. Appl. Phys.* **67** (10), 6454–6460 (1990).