

УДК 621.383.4/5

Применение модели показателя преломления в исследованиях оптических свойств ГЭС КРТ

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

Проведен анализ существующих моделей показателя преломления КРТ. Разработана усовершенствованная модель зависимости 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 спектральный диапазон, гетероэпитаксиальные структуры, показатель преломления, спектры пропускания.

Введение

Матричные фотоприемные устройства на основе тройных полупроводниковых соединений кадмий-ртуть-теллур (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 слоев, а также структуры с тремя и более рабочими слоями.

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 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 (молярной 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 позволят повысить вероятность обнаружения и идентификации объектов за счет использования их признаков в обоих диапазонах, измерять абсолютные значения температуры и решать ряд других задач.

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-

Никонов Антон Викторович, инженер¹.

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 30 июля 2013 г.

© Никонов А.В., Болтарь К.О., Яковлева Н.И., 2013

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

Обзор моделей показателя преломления КРТ

Фундаментальные свойства КРТ ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) 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, а $A_1, A_2, A_3, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ – коэффициенты Селлмейера, характерные для конкретного 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 [4] 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 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ 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, т.е. 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:

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

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

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

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 преломления 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 опи-

сывает в полной мере характер показателя преломления на больших длинах волн.

Для построения модели показателя преломления на больших длинах волн используются соотношения, которые связывают показатель преломления 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 $0 \leq x \leq 1$, $4,2 \text{ К} \leq T \leq 300 \text{ К}$.

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} К^{-1} .

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

Модель спектра ИК-пропускания

Инфракрасная спектроскопия широко используется для исследования спектров пропускания многослойных эпитаксиальных структур. Вопрос прохождения излучения через многослойные полупроводниковые структуры изучен рядом авто-

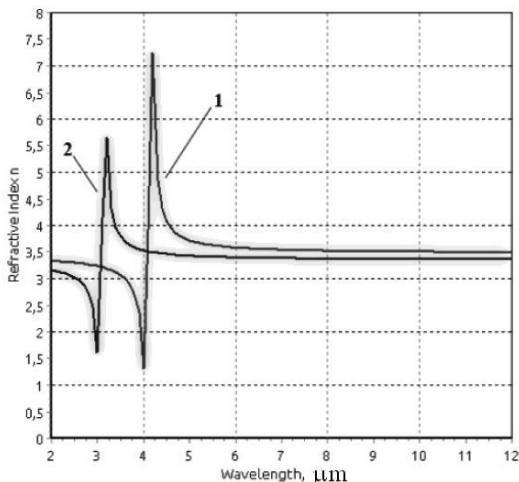


Рис. 1. Зависимость показателя преломления от длины волны. 1: $x = 0,2$ мол. дол., 2: $x = 0,3$ мол. дол.

ров [7, 9]. Для вычисления спектров отражения и пропускания гетероэпитаксиальных структур $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ устанавливается связь интенсивностей 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. 3). Используя матричный метод Абея для многослойной структуры КРТ [10], определяются соотношения между падающим (E_0^+), отраженным (E_0^-) и прошедшим через структуру (E_{s+1}^+) излучениями:

$$\begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s+1 \\ j=1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} s \\ j=1 \end{bmatrix} M_j \cdot \begin{bmatrix} 1 & r_{s+1} \\ r_{s+1} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_{s+1}^+ \\ 0 \end{bmatrix}$$

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

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

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

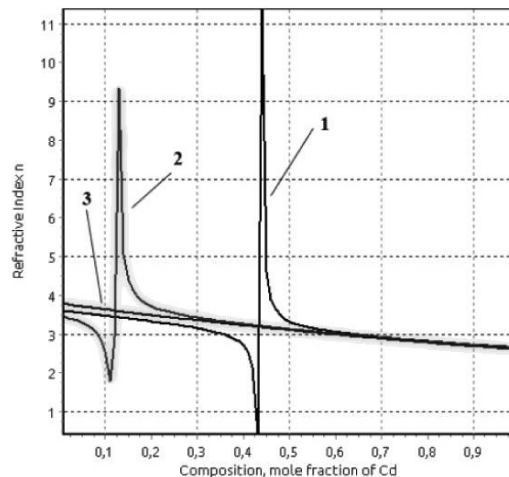


Рис. 2. Зависимость показателя преломления от состава: 1: $\lambda = 2 \text{ мкм}$, 2: $\lambda = 5 \text{ мкм}$, 3: $\lambda = 12 \text{ мкм}$.

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

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 $Att = \exp(-\frac{conc}{\lambda})$, $t_{sub} = \frac{4 \cdot N_{sub} \cdot N_0}{(N_{sub} + N_0)^2}$,

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

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

Анализ эффективности моделей преломления при моделировании спектров пропускания однослойных структур

В ходе исследований проведены измерения, моделирование и анализ спектров пропускания однослойных структур КРТ, выращенных методом МЛЭ. Характерный спектр пропускания опытного образца однослойной структуры приведен на рис. 4. Из экспериментальной характеристики видно, что форма спектра зависит от параметров 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.

Из визуального анализа рис. 5 и 6 следует, что в случае однослойных структур КРТ актуально использование обеих моделей, т.к. 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

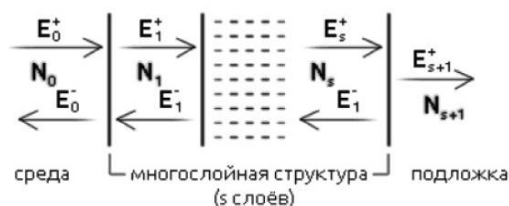


Рис. 3. Многослойная структура КРТ.

паспортным данным, но в случае расширенной модели ошибка вычислений значительно меньше по сравнению с классической моделью, а расчётные параметры находятся в лучшем соответствии с заявленными паспортными характеристиками.

Моделирование спектров пропускания сложных структур

На рис. 7 представлены экспериментальная характеристика и результаты моделирования спектра пропускания двухслойной структуры КРТ, выращенной методом МЛЭ на германиевой под-

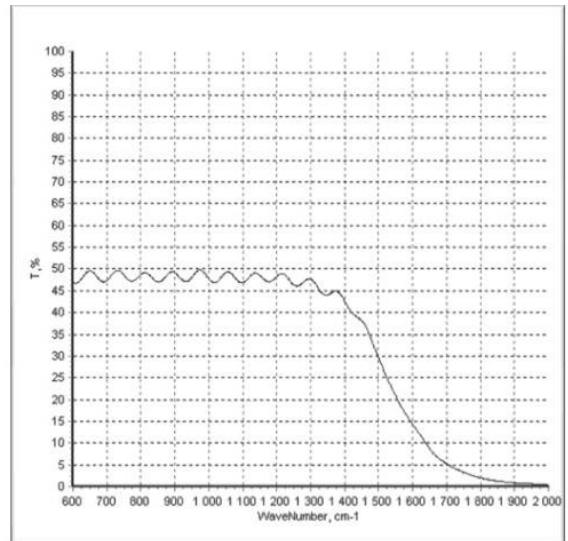


Рис. 4. Спектр пропускания однослойной структуры КРТ (экспериментальная характеристика).

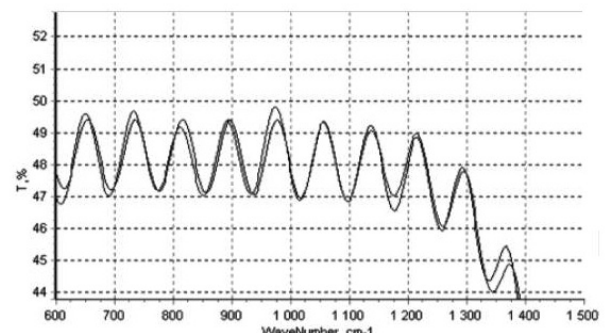


Рис. 5. Моделирование спектра пропускания однослойной структуры КРТ (классическая модель показателя преломления).

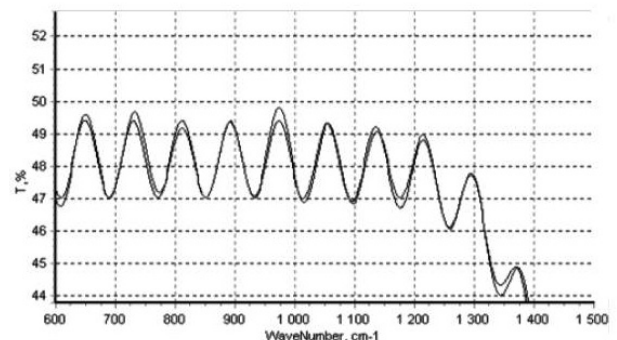


Рис. 6. Моделирование спектра пропускания однослойной структуры КРТ (расширенная модель показателя преломления).

Таблица 1

Образец: Э212-08-2	Паспортные данные	Классическая модель по- казателя преломления	Расширенная модель по- казателя преломления
Толщина рабочего слоя, мкм	20,0	17,76	17,88
Состав рабочего слоя, мол. дол.	0,223	0,2218	0,2224
Ошибка вычислений, %		0,2976%	0,1532%

Таблица 2

Спектр: МСТ76			
Параметр		Начальные данные	Результаты вычислений
Верхний варизонный слой	Толщина, мкм	0,5	0,3488
	Состав, мол.дол.	0,30	0,3044
	Неровность, мкм	0,1	0,1
Первый рабочий слой	Толщина, мкм	6,0	6,1626
	Состав, мол.дол.	0,35	0,3612
Второй рабочий слой	Толщина, мкм	4,0	3,7250
	Состав, мол.дол.	0,40	0,3890
Нижний варизонный слой	Толщина, мкм	0,5	0,4375
	Состав, мол.дол.	0,50	0,5051
Буферный слой	Толщина, мкм	6,0	6,6527
Ошибка вычислений, %			2,53770%

ложке с буферным слоем CdZnTe. Паспортные данные на структуру и результаты вычислений приведены в табл. 2.

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

зволило снизить ошибку вычислений параметров от 4 % до 2,5 %.

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.

Заключение

Проведен анализ существующих моделей показателя преломления КРТ. Разработана усовершенствованная модель зависимости показателя преломления, основанная на уравнениях Хёви-Вандамма и Крамерса-Кронига, находящаяся в хорошем соответствии с классической моделью и дополняющая её.

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.

Проведенные расчеты и экспериментальные исследования предоставили возможность совершенствования методик контроля многослойных ГЭС КРТ, необходимых для изготовления фотоприемных устройств нового поколения.

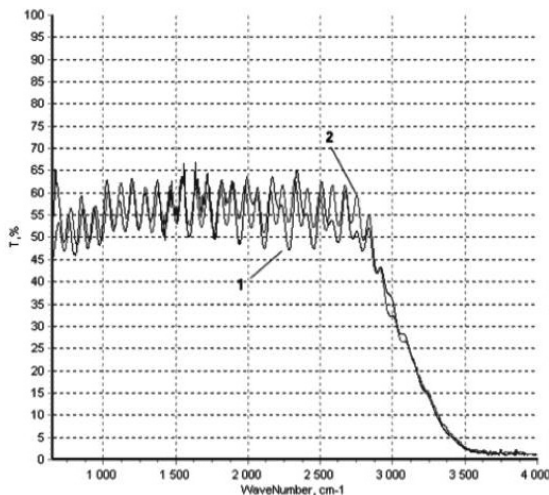


Рис. 7. Спектр пропускания двухслойной структуры КРТ, выращенной методом МЛЭ на германиевой подложке с буферным слоем CdZnTe (1 — экспериментальная характеристика, 2 — модель спектра).

Литература

1. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко 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., Кащуба А.С., Удалова А.Г. // Прикладная физика. 2008. № 1. С. 26
8. Hansen GL, Schmit JL, Casselman TN // 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 in optical properties research of CdHgTe heterostructures

A.V. Nikonov, K.O. Boltar, and N.I. Iakovleva

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

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. Structure parameters were estimated with enhanced program. Calculations of CdHgTe heterostructures thickness and composition were made for samples grown by molecular-beam epitaxy and MOCVE epitaxy.

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

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

Bibliography — 10 references

Received July 30, 2013