

УДК 621.383.4/5

## Экспериментальные исследования и расчеты спектральной зависимости коэффициента поглощения в однослойных эпитаксиальных структурах HgCdTe

Н. И. Яковлева, А. В. Никонов, В. В. Шабаров

*Проведены исследования и расчеты коэффициента поглощения для структур HgCdTe, выращенных методами жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) и эпитаксией металлоорганических соединений из газовой фазы (МОСVD) и сравнение экспериментальных данных с теоретической моделью спектра поглощения, основанной на явлении собственного поглощения и общей теории прямых межзонных оптических переходов, и с другими эмпирическими зависимостями. Проведены расчеты смещения уровня Ферми исследованных структур HgCdTe, а также наклона экспериментальных характеристик поглощения.*

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

*Ключевые слова:* КРТ, коэффициент поглощения, оптические переходы, правило Урбаха, модель Кейна, уровень Ферми.

### Введение

Оптические коэффициенты исходных фоточувствительных полупроводниковых материалов важны для проведения предварительных оценок фотоэлектрических характеристик в процессе производства матричных фотоприемных устройств [1—3]. Зная точную спектральную зависимость коэффициента поглощения оптического излучения можно прогнозировать квантовую эффективность ФПУ и спектральную характеристику фоточувствительности [4].

Коэффициент поглощения оптического излучения определяется из соотношения энергии фотонов падающего излучения и энергии запрещенной зоны полупроводника. Для анализа коэффициента собственного поглощения обычно рассматривается диапазон энергий квантов излучения (фотонов) более и менее ширины запрещенной зоны  $E_g$ .

Область энергий, которая примерно на несколько сотен мэВ выше уровня зоны проводимости и симметрично — менее уровня валентной зоны, является зоной собственного (фундаментального) поглощения или областью Кейна (Kane region).

Именно в ней располагаются энергетические уровни, на которые вследствие поглощения оптического излучения переходят электроны [5, 6].

По теории зонных переходов в собственных полупроводниках, известно, что запрещенная область энергии должна иметь резкие границы. Это предполагает, что коэффициент поглощения в области энергий ( $\hbar\omega < E_g$ ) должен быть нулевым.

Тем не менее, в своих исследованиях [7] Урбах установил, что на краю поглощения коэффициент поглощения не обращается в ноль, а убывает по экспоненциальному закону. Область энергий меньших  $E_g$ , в которой возможно поглощение оптического излучения, получила название области или «хвоста» Урбаха (Urbach tail). Она также должна быть учтена при анализе коэффициента поглощения [8, 9].

Вследствие выше названных причин, спектральная зависимость коэффициента поглощения оптического излучения включает области, в которых энергия падающего излучения меньше и больше ширины запрещенной зоны, при этом область собственного поглощения определяет характер поведения спектральной чувствительности ФПУ в максимуме его характеристики. Точка перегиба характеристики поглощения [10], в которой меняется характер зависимости поглощения от экспоненциальной к корневой, для реальных полупроводниковых структур не совпадает с теоретическим значением энергии запрещенной зоны  $E_{opt} \neq E_g$ , рассчитанному по известному составу и температуре, что свидетельствует о наличии неоднородностей в материале HgCdTe.

Яковлева Наталья Ивановна, зам. начальника НИЦ<sup>1</sup>.  
Никонов Антон Викторович, ведущий инженер НИЦ<sup>1,2</sup>.  
Шабаров Владимир Вениаминович, начальник управления<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>АО «НПО «Орион».

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

Тел. 8 (499) 374-81-30. E-mail: orion@orion-ir.ru

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (МФТИ).

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

Статья поступила в редакцию 27 октября 2015 г.

© Яковлева Н. И., Никонов А. В., 2015

Целью данной работы является проведение исследований и расчетов коэффициента поглощения для структур HgCdTe, выращенных методами жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) и эпитаксией металлоорганических соединений из газовой фазы (MOCVD), и сравнение экспериментальных данных с теоретической моделью спектра поглощения, основанной на явлении собственного поглощения и общей теории прямых межзонных оптических переходов, и с другими эмпирическими зависимостями.

### Исходные данные

Для сравнения с экспериментальными данными построено несколько теоретических моделей коэффициента поглощения в материале HgCdTe, при этом для дисперсии энергии в зоне проводимости и валентной зоне в различных источниках использовались как уравнения Кейна, так и более простые зависимости распределения, например, параболические и гиперболические, в соответствии с работами [11—14]. Законы распределения плотности состояний в валентной зоне и зоне проводимости позволяют определить эффективные массы носителей заряда, а именно, электронов  $m_e^*$  и легких дырок  $m_{lh}^*$ , а также коэффициент непараболичности. В расчетах далее использовались значения эффективной массы электронов  $m_e^*$  и легких дырок  $m_{lh}^*$ , а также тяжелых дырок  $m_{hh}^*$  [15], равное  $m_{hh}^* = 0,55 m_0$ . Коэффициент непараболичности зон рассчитывался по формуле [16]

$$A = \frac{k_B T}{E_g} \cdot \left(1 - \frac{m_e^*}{m_0}\right)^2$$

где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны, а отношение  $\frac{m_0}{m_e^*}$  определялось из выражения работы [17]:

$$\frac{m_0}{m_e^*} = 1 + 2F + \frac{E_g}{3} \cdot \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta}\right).$$

Здесь  $\Delta$  и  $F$  — параметры, которые принимают значения:  $\Delta = 1$  эВ;  $F = -0,8$ .

Распределение плотностей состояний  $\rho$  определялось по формуле Кейна [18]:

$$\rho \approx \exp(a(E - \nu)^n),$$

где  $a$  — постоянная;  $\nu$  — значение потенциальной энергии;  $n$  — показатель степени, который изменяется в диапазоне от 0,5 до 2.

### Анализ линейного коэффициента поглощения в материале HgCdTe

#### Коэффициент поглощения в области Урбаха

При энергиях фотонов, меньших ширины запрещенной зоны ( $\hbar\omega < E_g$ ), линейный коэффициент поглощения (показатель поглощения) носителей заряда убывает в соответствии с зависимостью Урбаха [19]:

$$\alpha = \alpha_0 \cdot \exp\left(\frac{\sigma \cdot (E - E_0)}{k_B T}\right)$$

где  $E = \hbar\omega$  — энергия фотона излучения;

$\alpha_0$  — коэффициент поглощения при значении энергии  $E = E_0$ ;

$k_B$  — постоянная Больцмана;

$T$  — рабочая температура;

$\frac{\sigma}{k_B T}$  — наклон Урбаха, который характеризует

степень крутизны зависимости коэффициента поглощения и зависит от параметров материала.

Присутствие «хвоста» Урбаха в материале Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te можно объяснить флуктуациями ширины запрещенной зоны, возникающими из-за несовершенства кристаллической структуры материала вследствие неоднородности состава по толщине и площади пластин HgCdTe, что неоднократно подтверждалось исследованиями кристаллического совершенства материала [5, 20].

Расчет параметров из формулы Урбаха приведен в монографии Шу [21], при этом  $E_0$  и  $\alpha_0$  зависят от состава  $x$  и определяются уравнениями

$$E_0(\text{eV}) = -0,355 + 1,77x$$

$$\ln \alpha_0 = -18,5 + 45,68x$$

Определяя последовательно энергию ширины запрещенной зоны  $E_g$  в соответствии с [22] (Chu et al., 1983) в виде ряда:

$$E_g(x, T) = -0,295 + 1,87x - 0,28x^2 + (6 - 14x + 3x^3) \cdot 10^{-4} \cdot T + 0,35 \cdot x^4,$$

затем коэффициент поглощения при условии равенства энергии фотонов и ширины запрещенной зоны с помощью выражения:

$$\alpha_g = -65 + 1,88T + (8694 - 10,31T)x,$$

можно при известном значении состава и температуры рассчитать наклон характеристики поглощения (наклон Урбаха) следующим образом:

$$\frac{\sigma}{k_B T} = \frac{(\ln \alpha_g - \ln \alpha_0)}{(E_g - E_0)}.$$

В табл. 1 приведены параметры, входящие в формулу Урбаха, а именно,  $E_0$ ,  $\alpha_0$ ,  $E_g(x, T)$ ,  $\alpha_g$

для значений состава в наиболее широко используемом диапазоне от 0,2 до 0,4 мольных долей.

Таблица 1

Параметры, входящие в формулу Урбаха

$x$	$E_0(x)$	$\ln(a_0)$	$a_0$	$E_g(x, T = 80 \text{ K})$	$E_g(x, T = 300 \text{ K})$	Alfag ( $x, 80 \text{ K}$ )	Alfag ( $x, 300 \text{ K}$ )	Наклон характеристики поглощения ( $T = 80 \text{ K}$ )	Наклон характеристики поглощения ( $T = 300 \text{ K}$ )
0,200	0,001	-9,364	0,000	0,094	0,165	1654,440	1601,200	176,299	100,810
0,220	0,034	-8,450	0,000	0,127	0,192	1811,344	1711,420	171,745	100,715
0,240	0,070	-7,537	0,001	0,160	0,219	1968,248	1821,640	167,118	100,646
0,260	0,105	-6,623	0,001	0,193	0,246	2125,152	1931,860	162,377	100,596
0,280	0,141	-5,710	0,003	0,2	0,273	2282,056	2042,080	157,468	100,557
0,300	0,176	-4,796	0,008	0,259	0,300	2438,960	2152,300	152,333	100,514
0,320	0,211	-3,882	0,021	0,291	0,327	2595,864	2262,520	146,903	100,449
0,340	0,247	-2,969	0,051	0,324	0,354	2752,768	2372,740	141,102	100,336
0,360	0,282	-2,055	0,128	0,357	0,381	2909,672	2482,960	134,843	100,136
0,380	0,318	-1,142	0,319	0,389	0,408	3066,576	2593,180	128,031	99,798
0,400	0,353	-0,228	0,796	0,422	0,435	3223,480	2703,400	120,562	99,246

Подставляя параметры из табл. 1 в формулу Урбаха, можно рассчитать коэффициент поглощения при энергиях, меньших ширины запрещенной зоны.

**Теоретические модели коэффициента поглощения**

Наиболее полные теоретические исследования коэффициента поглощения  $\alpha(\hbar\omega)$  для образцов различного состава в широком диапазоне температур и энергий были выполнены Чу [22], который усовершенствовал уравнения Кейна путем учета закона Бурштейна-Мосса, а также вывел зависимость коэффициента поглощения для материала HgCdTe при наличии вырождения. Подобно каноническим уравнениям Кейна [23], коэффициент поглощения рассчитывается как сумма двух составляющих, учитывающих переходы электронов из зон легких и тяжелых дырок в зону проводимости, т. е. имеем выражение:

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

где

$$\alpha_{c-lh}(\hbar\omega) = \frac{1 + 2(E_g / \hbar\omega)^2}{137\sqrt{6}\sqrt{\epsilon_{\infty}}} \frac{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_g^2}}{4P} BM_{lh}$$

$$\alpha_{c-hh}(\hbar\omega) = \frac{\sqrt{3/2}}{137\sqrt{\epsilon_{\infty}}} \frac{1}{P} \times$$

$$\times \frac{\sqrt{\hbar\omega} \sqrt{\hbar\omega - E_g}}{1 + \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 E_g}{m_0 P^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right)} \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1\right) BM_{hh}.$$

Здесь  $\epsilon_{\infty}$  — высокочастотная составляющая диэлектрической функции, которую можно определить из формулы

$$\epsilon_{\infty} = 15,2 - 15,5x + 13,76x^2 - 6,32x^3.$$

В приведенных формулах использованы следующие стандартные обозначения:

- $\hbar\omega$  — энергия кванта,
- $c$  — скорость света,
- $n$  — коэффициент преломления;
- $P = 8 \times 10^{-8}$  эВ·см — момент матричного элемента;
- $m_{hh} = 0,55m_0$  — масса тяжелых дырок;
- $m_0$  — масса свободного электрона;
- $k_B$  — постоянная Больцмана;
- $T$  — температура;
- $E_F$  — энергия, соответствующая уровню Ферми;
- $BM_{lh}$  и  $BM_{hh}$  — коэффициенты Бурштейна-Мосса соответственно для зон легких и тяжелых дырок, которые определяются в соответствии с формулами:

$$BM_{lh} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left(1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega + E_g - 2E_F}{2k_B T}\right)\right) \cdot \left(1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_g + 2E_F}{2k_B T}\right)\right)}$$

$$BM_{hh} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left(1 + \exp\left(-\frac{E_F + (\hbar^2 k_\omega^2 / 2m_{hh})}{k_B T}\right)\right) \cdot \left(1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_F - (\hbar^2 k_\omega^2 / 2m_{hh})}{k_B T}\right)\right)}$$

$$k_\omega^2 = \frac{\frac{4P^2}{3} + \frac{\hbar^2 E_g}{m_0} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right) \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1\right)}{\frac{\hbar^4}{m_0^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right)^2} \left[ 1 - \sqrt{1 - \frac{\frac{4\hbar^2}{m_0^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right)^2 \cdot \hbar\omega (\hbar\omega - E_g)}{\left[\frac{4P^2}{3} + \frac{\hbar^2 E_g}{m_0} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right) \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1\right)\right]^2}} \right]$$

На рис. 1 представлены зависимости коэффициента поглощения в материале HgCdTe для трех различных составов  $x = 0,2; 0,3; 0,4$ , рассчитанные при  $T = 80$  К по модели Шу в области  $E > E_g$  и по модели Урбаха в области  $E < E_g$  при отсутствии вырождения. Для удобства представления экспериментальных данных, в области энергий  $E < E_g$  возможно использование экспоненциальной зависимости, также полученной Шу:

$$\alpha = \alpha_g \cdot \exp\left[\beta(E - E_g)\right]^{1/2},$$

при этом коэффициент  $\beta$  зависит от состава и температуры и вычисляется по формуле

$$\beta(x, T) = -1 + 0,083T + (21 - 0,13T)x.$$

Эмпирическая зависимость коэффициента поглощения для материала HgCdTe в области собственного поглощения Кейна (при условии  $E > E_g$ ) хорошо описывается формулой, полученной Шэкманом и Финкманом [24] (Schacham and Finkman, 1985):

$$\alpha = B \cdot (E - E_g)^{1/2},$$

где  $B = 2,109 \cdot 10^5 \cdot [(1+x)/(81,9+T)]^{1/2}$ . Данная эмпирическая зависимость коэффициента поглощения близка к классической формуле собственного поглощения  $\alpha(\hbar\omega) = A \cdot (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$  при рассмотрении зонной диаграммы с параболическим законом дисперсии.

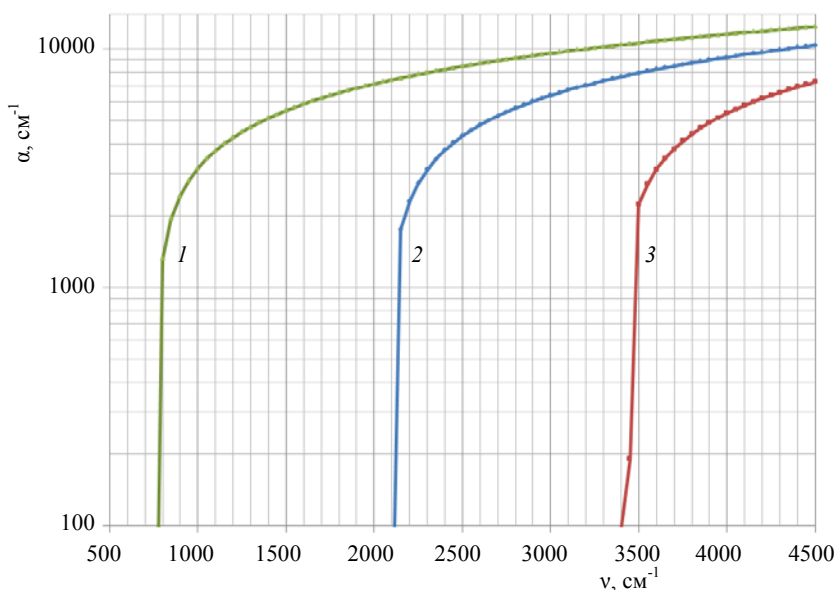


Рис. 1. Зависимости коэффициента поглощения  $\alpha$  от (спектроскопического) волнового числа  $\nu$  для трех различных составов  $x = 0,2$  (кривая 1);  $0,3$  (кривая 2);  $0,4$  (кривая 3), рассчитанные в соответствии с моделью Шу для невырожденных полупроводников при  $T = 80$  К

В работе [25] (Lubzens D., Rosenfeld D., and Y.Nemirovsky, 1988) представлена эмпирическая модель коэффициента поглощения, которая уточняет формулу Шэкмана и Финкмана. Коэффициент поглощения  $\alpha(k)$  в заданной области волновых чисел  $k$  находится из законов дисперсии зоны проводимости, зоны легких и тяжелых дырок и зависит от состава, температуры в соответствии с уравнениями:

$$\alpha(v, x, T, E) = \alpha_0 \exp\left(\frac{\sigma(E - E_0)}{W}\right) \text{ для } \alpha < 800 \text{ см}^{-1}$$

$$\alpha(v, x, T, E) = \beta(E - E_0 - E')^{1/2} \text{ для } \alpha > 800 \text{ см}^{-1}$$

где входящие в состав модели параметры определяются по формулам:

$$E = hcv$$

$$\alpha_0 = \exp(53,61 \cdot x - 18,88)$$

$$\sigma = 3,267 \cdot 10^4 \cdot (1+x), W = 81,9 + T$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{\epsilon_\infty}}{c} \int w(k) \left( \frac{1}{1 + \exp((E_V(k) - E_F) / k_B T)} - \frac{1}{1 + \exp((E_C(k) - E_F) / k_B T)} \right) \frac{2vd^3k}{(2\pi)^3},$$

где  $v$  — объем элементарной ячейки;  $c$  — скорость света в вакууме;  $\epsilon_\infty$  — высокочастотная диэлектрическая постоянная;  $\hbar$  — постоянная Планка;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $E_F$  — энергия уровня Ферми;  $k$  — модуль волнового вектора;  $T$  — температура;  $w(k)$  — вероятность переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости в единицу времени, которую, в свою очередь, можно определить следующим выражением:

$$w(k) = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{VC}|^2 \delta[E_C(k) - E_V(k) - \hbar\omega]$$

где  $H_{VC}$  — гамильтониан взаимодействия электрона и фотона, определяемый из выражения

$$H = \frac{e}{m_0 c} \mathbf{A} \mathbf{P}; \mathbf{A} \text{ — вектор-потенциал электромагнитной волны подающего излучения; } \mathbf{P} \text{ — оператор момента импульса электрона; } m_0 \text{ — масса свободного электрона; } e \text{ — электрический заряд электрона.}$$

При вычислении коэффициента поглощения в данной модели использованы законы дисперсии

$$\beta = 2,109 \cdot 10^5 \cdot (1+x)^{1/2} \cdot W^{-1/2}$$

$$E_0 = 1,838 \cdot x - 0,3424 + 0,148x^4$$

$$E' = (6,29 \cdot 10^{-2} + 7,68 \cdot 10^{-4} T) \times (1 - 2,14x) / (1+x)$$

Отметим, что в предложенной модели первое уравнение представляет собой закон Урбаха, а второе уравнение близко к классической зависимости коэффициента поглощения. Входящие в состав модели коэффициенты получены экспериментально.

Для прямозонных полупроводников, облучаемых излучением с энергией кванта  $\hbar\omega$ , неплохие результаты при расчете коэффициента поглощения можно получить при использовании эмпирической модели Натана [26] (Nathan, 1998), в соответствии с которой коэффициент поглощения вычисляется по формуле:

энергии для зоны проводимости  $E_C(k)$  и валентной зоны  $E_V(k)$ , представленные формулами:

$$E_V(k) = -\frac{E_g}{2} \left[ 1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^* E_g} \right]^{1/2},$$

$$E_C(k) = \frac{E_g}{2} \left[ 1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^* E_g} \right]^{1/2},$$

где  $m^*$  — эффективная масса.

Уравнения, описывающие поведение энергии зоны проводимости и валентной зоны, симметричны относительно середины запрещенной зоны, которая условно принимается за нулевой отсчет энергии. Окончательно зависимость коэффициента поглощения, в соответствии с работой [26], можно представить как следующее выражение:

$$\alpha(\omega) = \frac{2e^2}{c\hbar^2} \sqrt{\frac{m^* E_g}{\epsilon_\infty}} \times \sqrt{\left(\frac{\hbar\omega}{E_g}\right)^2 - 1} \times BM$$

где  $BM$  — коэффициент Бурштейна-Мосса, вычисляемый по формуле:

$$BM = \left\{ \left[ 1 + \exp\left[\frac{-\hbar\omega - 2E_F}{2k_B T}\right] \right]^{-1} - \left[ 1 + \exp\left[\frac{\hbar\omega - 2E_F}{2k_B T}\right] \right]^{-1} \right\}^{-1}$$

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента поглощения для трех различных составов  $x = 0,2; 0,3; 0,4$ , рассчитанные в соответствии с моделью Натана для невырожденных полупроводников при  $T = 80$  К.

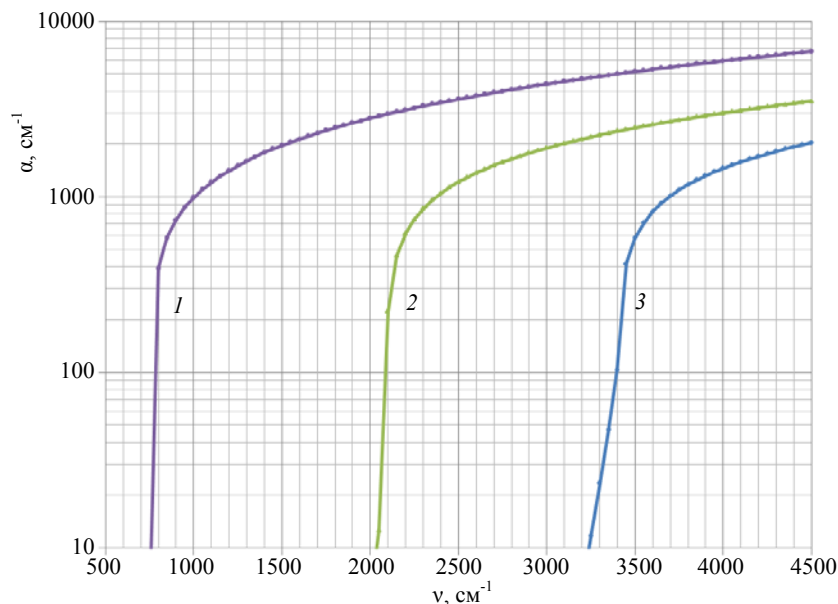


Рис. 2. Зависимости коэффициента поглощения  $\alpha$  от волнового числа  $\nu$  для трех различных составов  $x = 0,2$  (кривая 1);  $0,3$  (кривая 2);  $0,4$  (кривая 3), рассчитанные в соответствии с моделью Натана для невырожденных полупроводников при  $T = 80$  К

Энергию уровня Ферми можно рассчитать, исходя из законов дисперсии энергии зоны проводимости и валентной зоны, а также зная эффективные массы электронов и дырок, согласно формуле:

$$E_F(k) = \frac{E_C(k) + E_V(k)}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \left( \frac{m_V^*}{m_C^*} \right).$$

#### Экспериментальные данные и их обсуждение

Исследуемые образцы состояли из оптически прозрачной подложки (CdZnTe или GaAs), вакансионно-легированного поглощающего эпитаксиального слоя с концентрацией порядка  $N_A \approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . При выращивании слоев HgCdTe для уменьшения количества дефектов в структурах использовались переходные или варизонные слои. Образцы не имели грубых дефектов, плотность дислокаций для образцов, выращенных ЖФЭ, составляла менее  $10^5 \text{ см}^{-2}$ , для образцов, выращенных MOCVD, — менее  $10^6 \text{ см}^{-2}$ . Методом Фурье-спектрометрии на установке Vertex 70 проводились измерения спектров пропускания и отражения фоточувствительных структур при одинаковых значениях волновых чисел в диапазоне от 400 до  $7500 \text{ см}^{-1}$  при температуре  $T = 300$  К.

Эпитаксиальные структуры (ЭС) на основе тройного соединения HgCdTe выращивались методом жидкофазной эпитаксии в АО «Гиредмет»

на подложках CdZnTe диаметром 20—35 мм с толщиной слоя 10—20 мкм, состава  $x = 0,2—0,3$  мольной доли CdTe. На рис. 3 представлены спектры пропускания и отражения образца № 24-07-6, выращенного методом ЖФЭ.

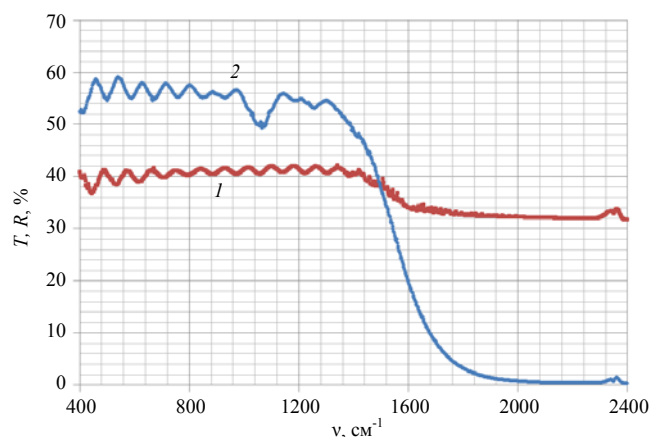


Рис. 3. Спектры пропускания и отражения образца № 24-07-6 ( $x = 0,2$ ), выращенного методом ЖФЭ. Кривая 1 — коэффициент отражения  $R$ ; кривая 2 — коэффициент пропускания  $T$

По экспериментальным данным спектра пропускания и отражения в однослойной структуре HgCdTe, выращенной методом ЖФЭ, рассчитывался спектр поглощения, представленный на рис. 4. Для сравнения коэффициента поглощения с теоретическими моделями построены зависимости коэффициента поглощения по приведенным выше эмпирическим формулам и определен состав  $x_{\text{CdTe}} = 0,2$  мольных долей в поглощающем слое HgCdTe. Из рис. 4 видно, что сопрягая зависимость коэффициента поглощения, построенной в соответствии с моделью Кейна, с экспоненциаль-

ной зависимостью Шу и Урбаха, можно добиться удовлетворительного соответствия с данными измерений.

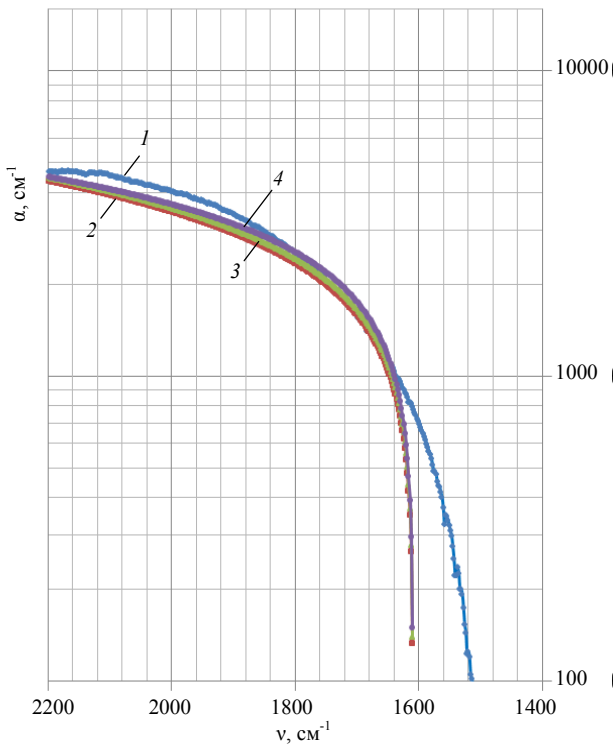


Рис. 4. Экспериментальная и теоретические зависимости от волнового числа  $\nu$  коэффициента поглощения  $\alpha$  для образца № 24-07-6 ( $x = 0,2$ ), выращенного методом ЖФЭ. Кривая 1 — эксперимент; кривая 2 — данные Натана ( $x = 0,2$ ;  $T = 300$ ); кривая 3 — данные Шу ( $x = 0,2$ ;  $T = 300$ ); кривая 4 — данные Финкмана ( $x = 0,2$ ;  $T = 300$ )

Гетероэпитаксиальные структуры HgCdTe с содержанием CdTe  $x = 0,2$ — $0,4$  мольных долей выращивались в ИХВВ РАН (Нижний Новгород) на подложках GaAs диаметром 50,8 мм ориентации (310) методом газовой эпитаксии из металлоорганических соединений (МОСVD) на экспериментальной ростовой установке. Эпитаксиальные рабочие слои КРТ  $p$ -типа проводимости характеризовались следующим основным параметром, а именно, толщина рабочего слоя HgCdTe составляла 8—10 мкм.

На рис. 5 представлены спектры пропускания и отражения образца № МСТ 50, выращенного методом МОСVD. По экспериментальным данным спектра пропускания и отражения рассчитан спектр поглощения, определен состав  $x_{\text{CdTe}} = 0,28$  мольных долей в поглощающем слое HgCdTe. Построены теоретические зависимости коэффициента поглощения (рис. 6), которые соответствуют данным эксперимента.

На рис. 7 представлены спектры пропускания и отражения образца № МСТ 41, выращенного методом МОСVD.

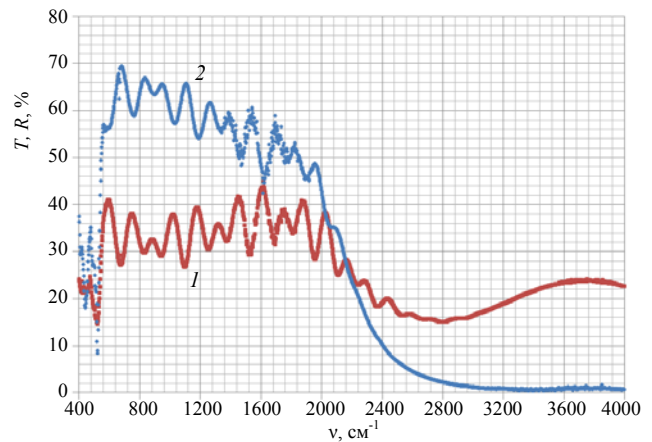


Рис. 5. Спектры пропускания и отражения образца № МСТ 50 ( $x = 0,28$ ), выращенного методом МОСVD. Кривая 1 — коэффициент отражения  $R$ ; кривая 2 — коэффициент пропускания  $T$

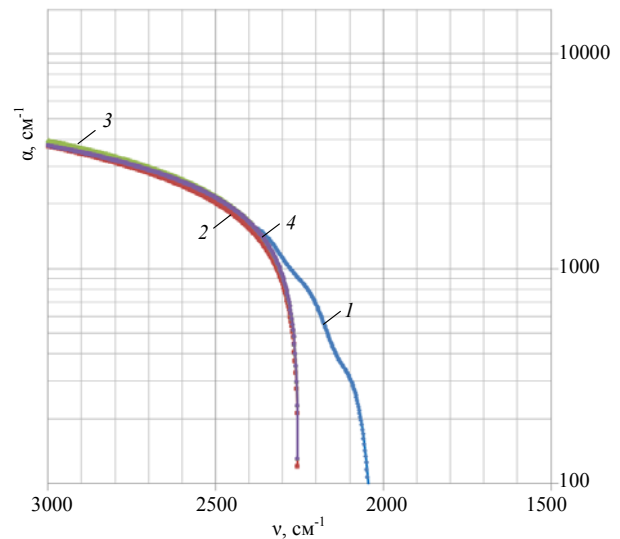


Рис. 6. Экспериментальная и теоретические зависимости от волнового числа  $\nu$  коэффициента поглощения  $\alpha$  для образца № МСТ 50 ( $x = 0,28$ ), выращенного методом МОСVD. Кривая 1 — эксперимент; кривая 2 — данные Натана ( $x = 0,28$ ;  $T = 300$ ); кривая 3 — данные Шу ( $x = 0,28$ ;  $T = 300$ ); кривая 4 — данные Финкмана ( $x = 0,28$ ;  $T = 300$ )

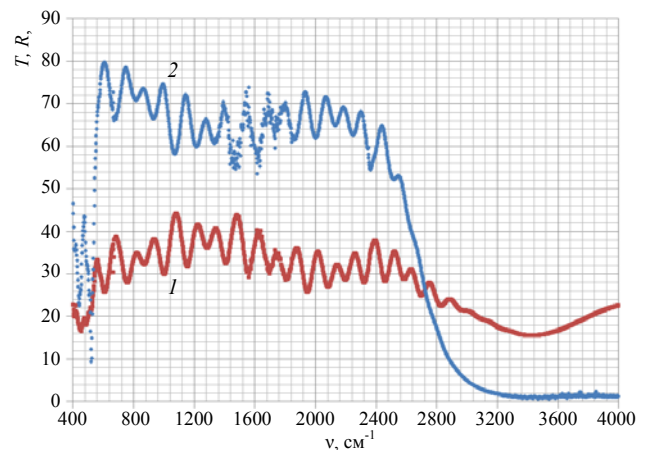


Рис. 7. Спектры пропускания и отражения образца № МСТ 41 ( $x = 0,334$ ), выращенного методом МОСVD. Кривая 1 — коэффициент отражения  $R$ ; кривая 2 — коэффициент пропускания  $T$

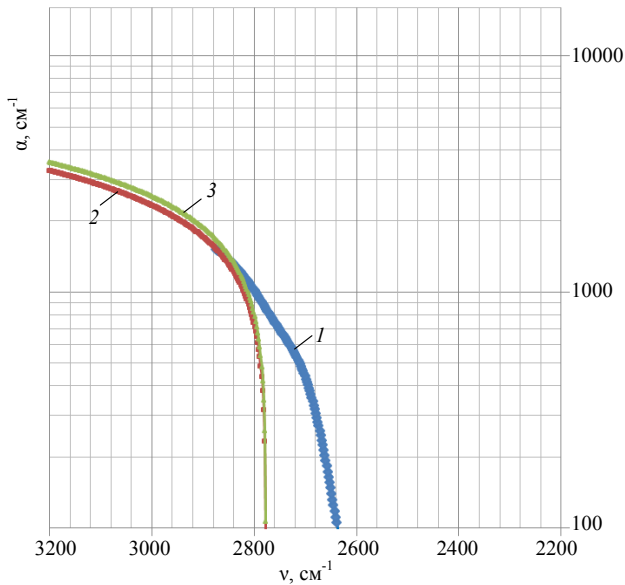


Рис. 8. Экспериментальная и теоретические зависимости коэффициента поглощения для образца № МСТ 41 ( $x = 0,334$ ), выращенного методом МOCVD. Кривая 1 — эксперимент ( $x = 0,334$ ;  $T = 300$ ); кривая 2 — данные Натана ( $x = 0,334$ ;  $T = 300$ ); кривая 3 — данные Шу ( $x = 0,334$ ;  $T = 300$ )

По экспериментальным данным спектра пропускания и отражения рассчитан спектр поглощения, представленный на рис. 8. Определен состав  $x_{\text{CdTe}} = 0,334$  мольных долей в поглощающем слое HgCdTe. На рис. 8 представлены теоретические зависимости коэффициента поглощения, которые соответствуют экспериментальным данным.

У всех экспериментальных образцов наблюдается больший наклон экспериментальной характеристики поглощения по сравнению с теоретической, что свидетельствует о наличии в структурах как локальных неоднородностей состава, так и варизонных слоев.

В области энергий  $\hbar\omega > E_g$  для образцов с одним эпитаксиальным слоем HgCdTe получено хорошее соответствие экспериментальных и теоретических спектров поглощения как при использовании уравнений Кейна [6], так и более простых эмпирических зависимостей.

Для всех исследованных образцов экспериментальные характеристики коэффициента поглощения имеют точку перегиба  $E_{opt}$ , в которой производная максимальна и не равна значению энергии запрещенной зоны, рассчитанному по составу и температуре. Таким образом, используя значения энергии  $E_{opt}$  в точке перегиба и энергию ширины запрещенной зоны  $E_g$ , можно определить абсолютное значение смещения  $\eta = E_{opt} - E_g$  и относительное смещение уровня Ферми в запрещенной зоне по формуле:

$$\varphi = \frac{E_{opt} - E_g}{k_B T}.$$

В табл. 2 представлены абсолютные значения смещения  $\eta$  для исследованных образцов HgCdTe. Они находятся в области  $\sim 0,01 \dots 0,025$  эВ. Смещение уровня Ферми необходимо учитывать при моделировании параметров структур HgCdTe.

Значение наклона экспериментальных характеристик поглощения у исследованных образцов и данные модели Урбаха представлены в табл. 3.

Для всех экспериментальных образцов отличие расчетных и экспериментальных данных наклона характеристик поглощения не превышает 15 %, что свидетельствует о возможности использования модели Урбаха для моделирования коэффициента поглощения.

Таблица 2

Смещение уровня Ферми

Номер образца	24-07-6	МСТ 50	МСТ 41
Состав $x$ , мол. дол.	0,2	0,28	0,334
$E_{opt}$ , эВ	0,2036	0,3045	0,3639
$E_g$ , эВ	0,1920	0,2790	0,3457
$\eta$ , эВ	0,0116	0,0255	0,0182

Таблица 3

Сравнение наклона характеристик поглощения

Номер образца	Состав, $x$ , мол. дол.	Наклон характеристики поглощения $\frac{\sigma}{k_B T}$	
		(теория) ( $T = 300$ К), эВ <sup>-1</sup>	(эксперимент) ( $T = 300$ К), эВ <sup>-1</sup>
24-07-6	0,2	100,810	112,162
МСТ 50	0,28	100,557	92,517
МСТ 41	0,334	100,377	114,531



Увеличение наклона экспериментальных характеристик поглощения по сравнению с теоретическими значениями можно объяснить локальными изменениями состава по толщине фоточувствительного слоя и наличием варизонных слоев в структурах HgCdTe. При этом оценка локального изменения состава по наклону характеристики показывает, что у образца 24-07-6 ( $x = 0,2$ ), выращенного методом ЖФЭ на подложке HgZnTe, неоднородность состава  $\Delta x \approx 0,005$  мольных долей, а у образцов МСТ 50 ( $x = 0,28$ ), МСТ 41 ( $x = 0,334$ ), выращенных методом МOCVD на подложках GaAs — неоднородность состава  $\Delta x \approx 0,015$  мольных долей, что примерно в 2—3 раза меньше неоднородности состава по площади пластин HgCdTe.

### Заключение

Проведены экспериментальные исследования коэффициента поглощения структур HgCdTe с фоточувствительным слоем  $p$ -типа проводимости, выращенных методами жидкофазной эпитаксии и эпитаксией из металлоорганических соединений, а также сравнение экспериментальных данных с теоретической классической моделью спектра поглощения, основанной на явлении собственного поглощения и общей теории прямых межзонных оптических переходов, а также с другими эмпирическими зависимостями.

Из анализа теоретических и экспериментальных данных получено, что на форму края поглощения спектральной зависимости поглощения при  $\hbar\omega \geq E_g$  заметное влияние оказывает непараболичность зоны проводимости. Непараболичность зоны проводимости может быть учтена с помощью эмпирических формул на основе классической модели Кейна. Локальные неоднородности состава и наличие варизонности в образцах с эпитаксиальным поглощающим слоем HgCdTe влияют на наклон характеристики поглощения для энергий  $\hbar\omega < E_g$ . При этом оценка локального изменения состава по наклону характеристики показывает, что у образца состава  $x = 0,2$ , выращенного методом ЖФЭ, неоднородность состава  $\Delta x \approx 0,005$  мольных долей, а у образцов состава  $x = 0,3$ , выращенных методом МOCVD — неоднородность состава  $\Delta x \approx 0,015$  мольных долей.

Работа выполнена по гранту Президента Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ НШ-2787.2014.9

### ЛИТЕРАТУРА

1. Филачев А. М., Таубкин И. И., Трищенко М. А. Современное состояние и магистральные направления развития современной фотоэлектроники. — М.: Физматкнига, 2010.
2. Boltar K. O., Burlakov I. D., Ponomarenko V. P., et al. // Proc. SPIE. 2009. V. 7298, 72982P-1—72982P-15.
3. Дирочка А. И., Корнеева М. Д., Филачев А. М. // Прикладная физика. 2011. № 2. С. 37.
4. Болтарь К. О., Никонов А. В., Яковлева Н. И. // Прикладная физика. 2012. № 3. С. 70.
5. Moazzami K., Phillips J., Lee D., et al. // J. Electron. Mater. 2004. V. 33. P. 701.
6. Яковлева Н. И., Болтарь К. О., Никонов А. В. и др. // Прикладная физика. 2014. № 3. С. 61.
7. Urbach F. // Phys. Rev. 1953. V. 92. P. 1324.
8. Finkman E. and Schacham S. E. // J. Appl. Phys. 1984. V. 56. P. 2896.
9. Chang Y., Badano G., Zhao J., et al. // J. Electron. Mater. 2004. V. 33. P. 709.
10. Chang Y., Guha S., Grein C. H., et al. // Journal of Electronic Materials. 2007. V. 36. No. 8. P. 1000.
11. Moazzami K., Phillips J., Lee D., et al. // J. Electron. Mater., 2005. V. 34. No. 6.
12. Hansen G. L., Schmit J. L., and Casselman T. N. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. P. 7099.
13. Scott M. W. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. P. 4077.
14. Krishnamurthy S. and Sher A. // J. Electron. Mater. 1995. V. 24. P. 641.
15. Brice J. and Capper P. (Eds.). Properties of Mercury Cadmium Telluride, EMIS Data Reviews Series No. 3. — INSPEC, IEE, London, 1987.
16. Jo N. H., Yoo S. D., Ko B. G., et al. // Proc. SPIE. 1998. V. 3436. P. 50.
17. Weiler M. H. Magneto-optical properties of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te alloys. In Book: Semiconductors and Semimetals. V. 16. P. 119—191. — Academic Press, New York, 1981.
18. Chang Y., Grein C. H., Sivananthan S., et al. In Proc. the 24th (2005) US Workshop on the Physics and Chemistry of II–VI Materials, (September 20—22, 2005, Boston, Massachusetts, USA).
19. Grein C. H. and John S. // Phys. Rev. 1989. V. B 39. P. 1140.
20. Сизов А. Л., Мирофьянченко А. Е., Ляликов А. В. и др. // Прикладная физика. 2014. № 6. С. 70.
21. Junhao Chu, Arden Sher. In Book: Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors, p. 239—379. — Springer Science + Business Media, LLC, 2008.
22. Chu J. H., Xu S. Q., and Tang D. Y. // Appl Phys Lett. 1983. No. 43, P. 1064.
23. Kane E. // Journal of Physics and Chemistry of Solids V. 1. Issue 4. P. 249.
24. Schacham S. E. and Finkman E. // J. Appl Phys. 1985. V. 57. P. 2001.
25. Lubzens D., Rosenfeld D., and Y. Nemirowsky // Infrared Phys, 1988. V. 28. No. 6. P. 417.
26. Nathan V. // Journal of applied physics. 1998. V. 83. No. 5. P. 2812.

## Investigation and calculation of absorption spectra in the HgCdTe single-layer epitaxial structures

N. I. Iakovleva<sup>1</sup>, V. Nikonov<sup>1,2</sup>, and V. V. Shabarov<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Moscow Institute of Physics and Technology  
9 Institute al., Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia

Received October 27, 2015

*The absorption spectra of the HgCdTe structures grown by liquid phase and metal organic vapor deposition have been investigated on the basis of the fundamental absorption edge caused by transitions of electrons from the valence band to the conduction band, Urbach absorption rule and other empirical study. The reduced Fermi level can be obtained through a measurement and calculation of  $E_g$  and  $E_{opt}$  values. The experimental and calculated absorption spectrum of a sample have showed that the measured absorption edge is broadened due to the compositional inhomogeneity through the depth of the sample.*

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

*Keywords:* CdHgTe, absorption coefficient, optical transactions, Urbach rule, Kane model, Fermi level.

### REFERENCES

1. A. M. Filachev, I. I. Taubkin, and M. A. Trishenkov, *The Current Status and Main-Line Trackage for Development of Photoelectronics* (Fizmatkniga, Moscow, 2010) [in Russian].
2. K. O. Boltar, I. D. Burlakov, Ponomarenko V. P., et al., Proc. SPIE **7298**, 72982P-1 (2009).
3. A. I. Dirochka, M. D. Korneeva, and A. M. Filachev, *Prikladnaya fizika*, No. 2, 37 (2011).
4. K. O. Boltar, A. V. Nikonov, and N. I. Iakovleva, *Prikladnaya fizika*, No. 3, 70 (2012).
5. Moazzami K., Phillips J., Lee D., et al. // *J. Electron. Mater.* **33**, 701 (2004).
6. N. I. Iakovleva, K. O. Boltar, A. V. Nikonov, et al., *Prikladnaya fizika*, No. 3, 61 (2014).
7. F. Urbach, *Phys. Rev.* **92**, 1324 (1953).
8. E. Finkman and S. E. J. Schacham, *Appl. Phys.* **56**, 2896 (1984).
9. Y. Chang, G. Badano, J. Zhao, et al., *J. Electron. Mater.* **33**, 709 (2004).
10. Y. Chang, S. Guha, C. H. Grein, et al., *Journal of Electronic Materials* **36**, 1000 (2007).
11. K. Moazzami, J. Phillips, D. Lee, et al., *J. Electron. Mater.* **34** (6), (2005).
12. G. L. Hansen, J. L. Schmit, and T. N. Casselman, *J. Appl. Phys.* **53**, 7099 (1982).
13. M. W. Scott, *J. Appl. Phys.* **40**, 4077 (1969).
14. S. Krishnamurthy and A. J. Sher, *Electron. Mater.* **24**, 641 (1995).
15. J. Brice and P. Capper (Eds.), *Properties of Mercury Cadmium Telluride*, *EMIS Data Reviews Series No. 3*, (INSPEC, IEE, London, 1987).
16. N. H. Jo, S. D. Yoo, B. G. Ko, et al., Proc. SPIE **3436**, 50 (1998).
17. Weiler M. H. *Magneto-optical properties of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te alloys*. In *Book: Semiconductors and Semimetals, V. 16, P. 119–191*. Ed. by R. K. Willardson and A. C. Beer, (Academic Press, New York, 1981).
18. Y. Chang, C. H. Grein, S. Sivananthan, et al., in *Proc. The 24th (2005) US Workshop on the Physics and Chemistry of II–VI Materials*, (September 20–22, 2005, Boston, Massachusetts, USA).
19. C. H. Grein and S. John, *Phys. Rev.* **B 39**, 1140 (1989).
20. A. L. Sizov, A. E. Mirofyanchenko, A. V. Lyalokov, et al., *Prikladnaya fizika*, No. 6, 70 (2014).
21. Junhao Chu, Arden Sher, in *Book: Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors* (2008 Springer Science + Business Media, LLC). P. 239–379.
22. J. H. Chu, S. Q. Xu, and D. Y. Tang, *Appl Phys Lett.*, No. 43, 1064 (1983).
23. E. Kane, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **1** (4), 249.
24. S. E. Schacham and E. Finkman, *J. Appl. Phys.* **57**, 2001 (1985).
25. D. Lubzens, D. Rosenfeld, and Y. Nemirovsky, *Infrared Phys.* **28**, P. 417 (1988).
26. V. Nathan, *Journal of Applied Physics* **83** (5), 2812 (1998).