

327-332

红外透射光谱在 HgCdTe 外延薄膜性能评价中的应用*

杨建荣 王善力[√] 郭世平 何力

TN213
048414

(中国科学院上海技术物理研究所国家红外物理实验室半导体薄膜材料研究中心, 上海, 200083)

A **摘要** 用最新发表的 HgCdTe 材料的光学常数对 MBE 工艺生长的 HgCdTe/CdTe/GaAs 材料的透射光谱进行了理论计算, 对受生长工艺破坏的衬底背面再次进行抛光处理, 消除因表面不平整引起的漫反射效应, 使实验测量得到的光谱曲线与理论计算结果很好地吻合, 由此得到的 HgCdTe 和 CdTe 外延层的厚度和解理面上用显微镜测量的数值相同, 准确度优于 $\pm 0.2\mu\text{m}$, 确定 HgCdTe 组分的准确度优于 ± 0.0025 .

关键词 HgCdTe, 外延层, 红外透射光谱, 薄膜

引言

① HgCdTe 是制备高性能长波红外探测器的关键材料, 继用体材料制备的单元器件实用化之后, 用 HgCdTe/ZnCdTe(衬底)外延材料所制备的焦平面探测器也已进入实用化^[1], 目前技术正在向研制更大规模更高性能的红外焦平面器件方向发展, 其中关键问题是如何在 GaAs、Si 和 Al₂O₃ 等异质衬底上生长出高质量的 HgCdTe 薄膜^[2], 从而改善外延材料的强度特性和与 Si 或 GaAs 材料所做的读出电路之间的热膨胀相容性, 并降低其材料的制备成本.

在外延材料制备中用光学方法非破坏性地精确测定材料的基本参数, 对于评价外延材料的均匀性和改进工艺提高材料性能是十分重要的. 关于 HgCdTe 光学常数的研究长期以来一直是 HgCdTe 材料物理特性研究的重要课题^[3~7], 刘卫军^[8]曾用该方法对 Hg_{0.6}Cd_{0.4}Te/CdTe/GaAs 的透射光谱进行过计算, 但计算结果和实验结果相差甚大. Lange^[9]等在评价 HgCdTe/CdTe/GaAs 外延层厚度均匀性时仅考虑光谱干涉条纹的间距, 而未分别给出 CdTe 和 HgCdTe 外延层的厚度. 为正确评价 HgCdTe/CdTe/GaAs 外延材料的物理性能, 本文就如何正确测量外延材料的透射光谱、基本光学常数的选用以及透射光谱的理论计算进行了研究, 在消除衬底背面不平整引起的漫反射效应后, 采用刘坤^[7]等人最新发表的 HgCdTe 材料的折射率常数, 使实验结果和理论计算得到了很好的吻合, 进而较准确地求得了外延材料的膜厚和组分.

1 双层膜透过率的理论计算

用 MBE 技术在低温下 ($\sim 180^\circ\text{C}$) 生长的 HgCdTe/CdTe/GaAs(衬底)材料, 其 CdTe/

• 国家 863 高技术基金资助项目
本文 1996 年 3 月 21 日收到, 修改稿 1996 年 6 月 17 日收到

HgCdTe 界面完整性非常好. 根据对 HgCdTe/CdTe/GaAs 各界面上光反射系数大小的计算, 可以证明光在 HgCdTe/CdTe/GaAs 材料的同一界面上经过两次以上反射或 CdTe 两侧界面经一次以上反射, 其光强在外延材料透射比的计算中可忽略不计. 实验测量表明 GaAs 衬底的光程长度已大于光谱仪光源的相干长度, 经过衬底的非相干二次反射光的光强也已小到可忽略不计, 因此, HgCdTe/CdTe/GaAs 材料的透射比的计算公式可简化为:

$$T = |E_T/E_I|^2 = (t_{1+} t_{2+} t_{3+} t_{4+})^2 \left\{ | \{ 1 + r_{2+} r_{1-} \exp(-2j\delta_1) + r_{3+} r_{2-} \exp(-2j\delta_2) + (r_{3+} t_{2+} t_{2-} r_{1-} + r_{2+} r_{1-} r_{3+} r_{2-}) \exp[-2j(\sigma_1 + \sigma_2)] + (r_{3+} t_{2+} t_{2-} r_{1-} \exp[-2j(\sigma_1 + \sigma_2)])^2 + [r_{2+} r_{1-} \exp(-2j\sigma_1)]^2 + 2r_{2+} r_{1-} t_{2+} r_{3+} t_{2-} r_{1-} \exp[-2j(2\sigma_1 + \sigma_2)] \} \exp(-j\sigma_1) |^2 (1 + \beta) \right\}, \quad (1)$$

式(1)中 $t_{i\pm}$ 和 $r_{i\pm}$ 为光在界面上的透射系数和反射系数 ($i=1$ 为空气/HgCdTe 界面, 2 为 HgCdTe/CdTe 界面, 3 为 CdTe/GaAs 界面, 4 为 GaAs/空气界面), 即 $t_{i\pm} = 2n_{i\pm}/(n_{i+} + n_{i-})$, $r_{i\pm} = \pm(n_{i+} - n_{i-})/(n_{i+} + n_{i-})$, 其中 $n_{i\pm}$ 为界面两侧材料的折射率, σ_1 和 σ_2 为 HgCdTe(MCT)和 CdTe(CT)外延层的光程长度, 在我们感兴趣的红外波段, GaAs 和 CdTe 对光的吸收可以忽略, 因此, σ_1 和 σ_2 的计算公式为

$$\sigma_1 = 2\pi n_{(MCT)} d_{(MCT)}/\lambda + j a_{(MCT)} d_{(MCT)}/2, \quad (2)$$

$$\sigma_2 = 2\pi n_{(CT)} d_{(CT)}/\lambda. \quad (3)$$

β 为经过衬底的非相干一次反射光对材料透射比的影响, 其计算公式为

$$\beta = (r_{4+} r_{3-})^2 + (r_{4+} t_{3-} r_{2-} t_{3+})^2 + |r_{4+} t_{3-} t_{2-} r_{1-} t_{2+} t_{3+} \exp(-j\sigma_1)|^2.$$

GaAs 和 CdTe 材料的折射率及其随波长变化关系已有文献报道^[10~12], Finkman^[3]和 Kucera^[5]对几种不同组分的 HgCdTe 材料的折射率-波长关系给出了经验公式, Kucera^[5]和刘昆^[7]等通过数值拟合得到了这一关系随组分的变化关系, 在我们的计算中引用了他们已发表的结果. HgCdTe 材料的吸收系数与材料组分和波长的关系按褚君浩^[13]等给出的最新研究结果为

$$\alpha = \alpha_0 (\alpha_g/\alpha_0) (E - E_0)/(E_g - E_0) \quad E < E_g, \quad (4)$$

本文无需对 $E > E_g$ 段光谱进行拟合即可求得外延材料的厚度 $d(MCT)$ 、 $d(CT)$ 和组分 x , 但若要从光谱曲线上分析外延材料组分纵向均匀性, 则需对吸收边的行为作精确的研究.

2 实验结果和理论拟合及外延膜厚度和组分的确定

在对 HgCdTe/CdTe/GaAs 样品进行红外透射光谱测量的过程中, 我们发现 GaAs 衬底背面的光洁度和平整度对测量结果有很大的影响, 主要反映在平均透射比 ($E < E_g$ 区域) 随着波数的增加而减小, 为此, 我们在实验测量中对受生长工艺破坏的 HgCdTe/CdTe/

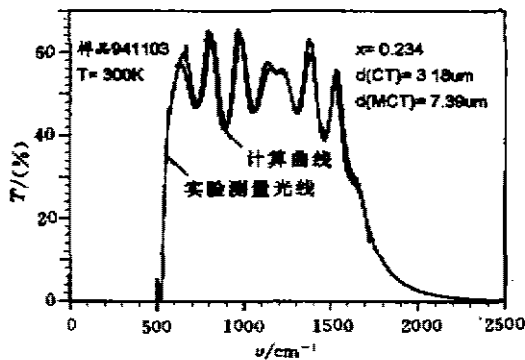


图1 HgCdTe/CdTe/GaAs-MBE 材料
红外透射光谱的测量和理论计算

Fig. 1 Experimental measurement and theoretical
calculation of infrared transmission spectra of
HgCdTe/CdTe/GaAs material grown by MBE

进行拟合时,可首先通过测定光谱上节点间的波数差来初步确定 CdTe 层的厚度,进而通过拟合干涉峰的间距确定 HgCdTe 的厚度,其中 HgCdTe 材料的组分通过拟合吸收边的位置来确定,进一步细调后即可最终确定 HgCdTe/CdTe/GaAs 外延材料的厚度和组分的理论拟合参数.拟合得到的透射光谱理论曲线(采用刘昆^[7]折射率-波长表达式)也在图 1 中给出,通过比较可以发现,实验结果中干涉条纹的结构和位置在理论上得到了较好的再现,干涉条纹的振幅及光谱的吸收边和理论计算有时略有差异,这是薄膜材料界面完善性、组分均匀性和理想材料有一定的差异所致,但这种差异对厚度拟合值的影响很小.

表 1 HgCdTe/CdTe/GaAs 材料外延层厚度光谱测量拟合值与光学显微镜测量值的比较

Table 1 Comparison of HgCdTe/CdTe/GaAs epilayer thickness measured by
infrared transmission spectra and optic microscope

样品编号	测试方法	折射率公式	组分 x	$d_{(CT)}$ (μm)	$d_{(MCT)}$ (μm)
941103	透射光谱	Liu ^[7]	0.234	3.18	7.39
	透射光谱	Kucera ^[5]	0.234	3.18	7.22
	透射光谱	Finkman ^[3]	0.234	3.18	7.29
	光学显微镜			3.1	7.6

表 1 列出了通过拟合计算得到的 CdTe 和 HgCdTe 外延层的厚度,拟合中分别采用了 Finkman^[3]、Kucera^[5]和刘昆^[7]的折射率计算公式,三者对 HgCdTe 厚度的拟合有 0.1~0.2 μm 的差异,为验证理论拟合的正确性,我们对样品解理后的纵剖面进行了光学显微镜测量,所得厚度数据也列在表 1 中,光学显微镜的测量值和光谱法得到的拟合值之间的差异在误差范围内,这表明通过理论分析用红外透射光谱测定 HgCdTe/CdTe/GaAs 外延材料厚度是一种可靠的测量手段.

GaAs 衬底背面进行了精细的表面抛光处理以消除表面不平整引起的漫反射效应,保证做到 $E < E_g$ 区域,平均透射比不随波数变化.图 1 给出了对用 MBE 技术生长的 HgCdTe/CdTe/GaAs 样品进行红外透射光谱测试所得到的实验曲线和相应的拟合计算的结果,长波方向 400cm^{-1} 左右处的吸收是衬底 GaAs 的声子吸收所致,在透光部分,双层结构的光干涉效应十分清楚,可用上述理论计算方法对实验结果进行拟合.分析公式(1)中各透射光的强度因子可见,除直接透射光外,经 HgCdTe 和 CdTe 外延层上下界面之间一次反射后透射出的光在干涉效应中起主要作用,两束光之间相干后形成的节点间波数差将由缓冲层 CdTe 的厚度所决定,因此,在进行

3 光谱测量结果的分析和应用

用透射光谱测定 HgCdTe/CdTe/GaAs 双层外延膜基本参数的精度取决于透射光谱对这些参数的敏感性和所用理论数据的准确度. 图 2 给出了在其它参数固定的情况下, HgCdTe 外延层、CdTe 缓冲层及组分变化对样品透射光谱所产生影响的计算结果(分别见图 2 中曲线 1、2、3). 结果表明外延层厚度变化 $0.2\mu\text{m}$, 其影响已可明显地从光谱的测试结果中分辨出来, 其中 HgCdTe 外延层厚度的变化是通过干涉峰的峰位来确定的, 而 CdTe 的厚度变化则通过节点处干涉峰形状的变化表现得十分清楚. 所用 FTS-7 红外光谱仪的分辨率为 2cm^{-1} , 实际读谱的误差小于 10cm^{-1} , 相应的厚度计算误差小于 $0.1\mu\text{m}$, 折射率常数本身的误差也将引入约 $\pm 0.1\mu\text{m}$ 的误差, 因此, 用光谱法测定 HgCdTe 外延层厚度的绝对准确度优于 $\pm 0.2\mu\text{m}$, 相对准确度则小于 $\pm 0.1\mu\text{m}$. 这一测量方法的准确度优于普通光学显微镜的测量精度, 从应用的角度看, 它已能满足红外焦平面器件选片的一般需要. 由于实际样品存在的组分均匀性问题及干涉条纹对透射光谱吸收边的干扰, HgCdTe 外延层组分的确定将受到一定的影响, 不考虑吸收系数与组分关系的误差, 这种影响导致光谱方法测定 HgCdTe-MBE 材料组分的准确度在 ± 0.0025 范围内. 在对同一样品的横向组分均匀性进行评价时, 横向组分差异的测量准确度则仅取决于读谱的误差, 这一误差小于 ± 0.0002 .

我们运用红外透射光谱对 2 英寸 95020 样品进行均匀性评价的结果见文献[14], 在 2 英寸的片子上选取了 25 个点进行测量, 对测量所得光谱进行拟合求得每一点上的外延层厚度和组分, 根据这些数据即可求得该样品 HgCdTe 外延层厚度的平均值为 $10.89\mu\text{m}$, 标准差为 $0.235\mu\text{m}$, CdTe 外延层厚度的平均值为 $3.05\mu\text{m}$, 标准差为 $0.076\mu\text{m}$, HgCdTe 外延组分平均值为 0.222 , 标准差为 0.0004 , HgCdTe 外延材料的均匀性是 HgCdTe 红外焦平面探测器制作对材料提出的最为重要的指标之一.

采用 Kucera^[5] 折射率-波长公式进行计算也可使长波区域的干涉谱线可得到较好的重现, 但由于该公式给出的折射率在 E_g 附近急剧增加, 会导致位于吸收边上的干涉峰较为明显, 两者的差异在 941005 样品的测试结果上反映较为明显(见图 3). Finkman^[3] 给出的折射率-波长关系与刘昆^[7] 公式相近, 仅在绝对值上稍有差异, 但他仅给出了某些特定组份的关系, 因此, 实际使用时采用刘昆^[7] 所给的公式较好.

4 结论

在保证 HgCdTe/CdTe/GaAs-MBE 材料表面的平整度前提下, 并采用最新发表的 HgCdTe 材料的光学常数, 该材料透射光谱曲线的理论计算值和实验测量结果得到了很好的吻合, 由此可精确地获取 HgCdTe 外延层和 CdTe 缓冲层的厚度及 HgCdTe 的组分, 其准确度分别优于 $\pm 0.2\mu\text{m}$ 和 ± 0.0025 , 在各种折射率-波长关系中, 刘坤^[7] 公式在 MBE 材料透射光谱理论计算上的应用最为成功. 运用这一方法可对大面积 HgCdTe 外延材料的均匀性作出准确的评价, 该方法的非破坏性特点决定了它在实际工艺中有着很大的使用价值.

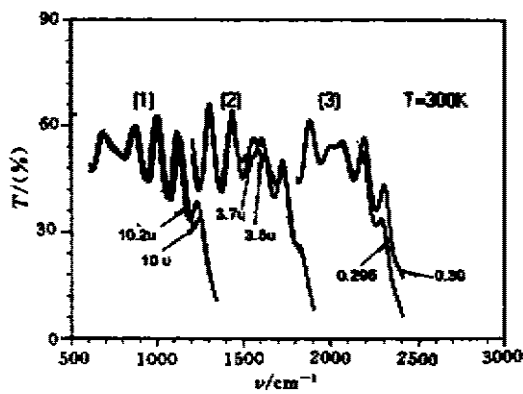


图 2 HgCdTe/CdTe/GaAs 材料外延层厚度和组分对材料红外透射光谱的影响
Fig. 2 Influence of epilayer thickness and composition of HgCdTe/CdTe/GaAs on its infrared transmission spectra

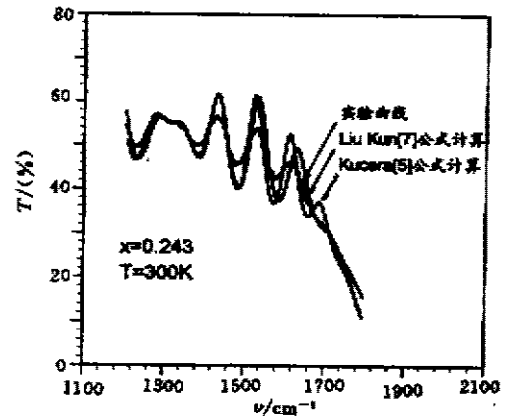


图 3 采用刘坤^[7]和 Kucera^[5]折射率-波数公式对 941005 号样品红外透射光谱计算的结果
Fig. 3 Infrared transmission spectra fitting for # 941005 sample by using wavenumber dependence of refractive index of Liu Kun^[7] and Kucera^[5]

参考文献

- 1 Paul R N. *SPIE*, 1994, **2274**, 82
- 2 Kozlonski L J, Bailey R B, Cooper D E, et al. *SPIE*, 1991, **1540**: 250
- 3 Finkman E, Nenirovsky Y. *J. Appl. Phys.*, 1979, **50**: 356
- 4 Perkowitz P, Thorland R H. *Phys. Rev. B*, 1974, **9**: 545
- 5 Kucera Z. *Phys. Status Solidi A*, 1987, **100**: 659
- 6 Chu J H, Mi Z Y, Tang D Y. *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**: 3955
- 7 Liu K, Chu J H, Li B, Tang D Y. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**(21): 2818
- 8 Liu W J, Liu P L, Shi G L, Zhu J B. *SPIE*, 1991, **1519**: 481
- 9 Lange M D, Sinanthan S, Chu X, Faurie J P. *Appl. Phys. Lett.*, 1988, **52**(12): 978
- 10 Palik E D. *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, Inc., 1985
- 11 Marple D T F. *J. Appl. Phys.*, 1964, **35**: 539
- 12 Pikhin A N, Yaskov A D. *Sov. Phys. - Semicond.*, 1988, **22**: 613
- 13 Chu J H, Li B, Liu K, Tang D Y. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**: 1234
- 14 王善力, 杨建荣, 郭世平, 等. *红外与毫米波学报*, 1996, **15**(5): 333

APPLICATION OF INFRARED TRANSMISSION SPECTRA IN ASSESSMENT OF HgCdTe EPILAYERS

Yang Jianrong, Wang Shanli, Guo Shiping, He Li

*(Semiconductor film research Center, National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai
Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)*

Abstract The optical constants published recently of HgCdTe were used for the calculation of the infrared transmission spectra of MBE-grown HgCdTe/CdTe/GaAs structures. After the damaged backside surfaces of the substrate were carefully polished once again to eliminate diffuse reflection effect, the experimental curves of the infrared transmission spectra can be quantitatively reproduced by the theoretical calculation. The epilayer thicknesses of HgCdTe and CdTe determined by a computer fitting procedure were consistent with that by optic microscope observation. The precision of the thickness deduced by the present method is better than $\pm 0.2\mu\text{m}$, and the precision of the composition is better than ± 0.0025 .

Key words HgCdTe, epilayer, infrared transmission spectra