

B⁺ 注入 HgCdTe 外延材料的红外透射光谱分析*

王庆学 魏彦锋 朱建妹 杨建荣 何 力

(中国科学院上海技术物理研究所半导体材料与器件研究中心, 上海 200083)

摘 要 运用多层模型和膜系传递矩阵以及非线性二乘法, 模拟了 B⁺ 注入碲镉汞外延材料的红外透射光谱, 结果表明 B⁺ 注入碲镉汞外延材料的红外透射光谱能够很好地理论再现, 并由此获得了结区的自由载流子浓度分布、迁移率、面自由载流子浓度以及折射率和消光系数等相关参量, 所得结果与微分 Hall 法测试的结果是一致的. 计算结果也表明 B⁺ 注入 HgCdTe 导致红外透射率变化的根本原因是注入层的高载流子浓度的等离子效应改变了该层的折射率和消光系数.

关键词 离子注入; 碲镉汞外延材料; 红外光谱; 载流子浓度分布

中图分类号 TN307 **文献标识码** A

0 引言

B⁺ 注入是制备高性能光伏型碲镉汞红外焦平面探测器的重要工艺, 为了提高对该工艺的认识和控制水平, 围绕 B⁺ 离子注入已开展了广泛的研究. 许多研究认为 B⁺ 注入碲镉汞并不是因为注入离子的电活性作为活性施主掺杂形成的 n 型区, 而主要是由于注入损伤造成的电活性缺陷引起的^[1]. 高分辨 X 射线衍射、X 射线漫散射、背散射、微分 Hall 法等是测试和评价 pn 结特性的重要技术^[2,3], 其中微分 Hall 法是测试结区载流子浓度分布的一种重要方法, 然而该方法是破坏性的, 并且测试过程复杂, 难于操作. 红外光谱是一种非破坏性、非接触的研究材料光电特性的有力手段, 它是根据自由载流子等离子效应的光学响应来获得有关载流子浓度分布状态等信息的^[4]. 本文基于自由载流子的等离子效应, 运用多层模型和膜系传递矩阵开展对 B⁺ 注入碲镉汞外延材料的红外透射光谱的理论模拟计算, 并通过模拟获得结区的自由载流子浓度分布以及迁移率等相关参量, 目的在于为碲镉汞 B⁺ 注入工艺提供有效的检测手段.

1 实验

所用碲镉汞液相外延样品采用富 Te 推舟法制备, 衬底为 (111)B 晶向的 CdZnTe 材料, 外延材料的组份和厚度采用红外吸收光谱技术测定, 衬底材料的组份被控制在 4% 左右, 碲镉汞材料的组份 x 为 0.22~0.23 之间, 厚度在 10~15 μm .

B⁺ 注入能量为 180 keV, 注入剂量为 $10^{15}/\text{cm}^2$,

注入束流小于 $0.1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ 以避免注入造成样品表面的升温效应, 同时, 为避免沟道效应, 注入方向偏离 [111] 晶向 7° . 红外透射光谱的测试采用 Nuxus 670 傅里叶红外光谱仪测量, 分辨率为 4 cm^{-1} , 测量范围为 $400\sim 4000 \text{ cm}^{-1}$, 入射几何为正入射.

2 理论模型

2.1 多层模型

当自由载流子的浓度较高时, 介电常数的低频行为主要由自由载流子的等离子效应决定. 由于离子注入在碲镉汞表面形成高载流子浓度的 n⁺ 型层, 所以, 材料表层的介电常数作为光频率的函数可以表达为^[5]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\epsilon_\infty \omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau_n)} \quad (1)$$

其中, 自由载流子的等离子振荡频率为

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_\infty m^*} \quad (2)$$

ϵ_∞ 为高频介电常数, τ_n 、 n 和 m^* 分别为自由载流子的散射时间、浓度和有效质量. 从而可以得到复折射率为

$$N = \sqrt{\epsilon(\omega)} \quad (3)$$

根据微分 Hall 测试可知, 离子注入碲镉汞 n⁺ 层的载流子浓度分布可以近似为具有不同标准差的两个半 Gauss 分布, 因此

$$n = n_{\max} \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) \quad (4)$$

x 为远离表面的距离, n_{\max} 和 R_p 分别为载流子浓度分布的峰值及其深度, ΔR_p 为标准偏差, 当 $x < R_p$ 时, $\Delta R_p = \Delta R_1$, 否则, $\Delta R_p = \Delta R_2$. 在计算红外透射光谱时, 把离子注入区分成多层, 假定每层的载流子浓度为常数. 另外, 对于具有组分梯度的液相外延 HgCdTe/CdZnTe 材料, 如图 1, 由于存在组分梯度, 则其光学常数也是 HgCdTe 薄膜厚度的函数.

*国家自然科学基金委创新研究群体科学基金(60221502) 资助

Tel: 021-65420850-13218 Email: qxwangemail@163.com

收稿日期: 2004-06-22

为了更加准确地拟合红外光谱,同样采用多层模型,把 HgCdTe 薄膜分成多层,假定每层的光学常数恒定. 这样,对于离子注入 HgCdTe/CdZnTe 结构的外延材料则分成了两个多层模型:一是载流子浓度分布;二是 HgCdTe 薄膜材料的组分梯度.

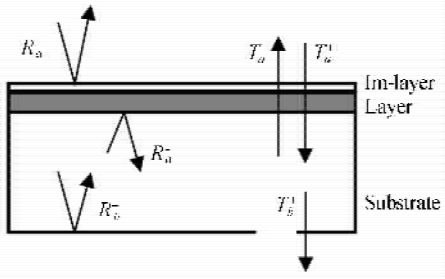


图1 光通过外延材料时的传播

Fig. 1 Schematic diagram of light transmission in epilayer material

2.2 多层模型的膜系传递矩阵

对于具有组分梯度和载流子浓度分布的 HgCdTe 薄膜,采用多层模型的膜系传递矩阵计算红外透射光谱,假定每层具有相同的组分和光学常数. 对于 m 层的膜系,由多层模型和膜系传递矩阵理论可以得到^[6]

$$\begin{bmatrix} E_{0,t}^+ \\ E_{0,t}^- \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E_{m+1/m,t}^+ \\ E_{m+1/m,t}^- \end{bmatrix} \quad (5)$$

其中, $E_{0,t}^+$ 和 $E_{0,t}^-$ 分别为入射介质中平行于界面的入射和反射电磁场矢量; $E_{m+1/m,t}^+$ 和 $E_{m+1/m,t}^-$ 分别为出射介质中平行于界面的出射和反射电磁场矢量; M 为膜系传递矩阵

$$M = \left(\prod_{k=1}^m V_{k-1}^{-1} V_k U_k \right) V_m^{-1} V_{m+1} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (6)$$

V_k 为导纳矩阵,表达式为

$$V_k = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \eta_k & -\eta_k \end{bmatrix} \quad (7)$$

V_k^{-1} 为 V_k 的逆矩阵, η 为光学导纳,对于正入射, $\eta = N$. U_k 为位相矩阵

$$U_k = \begin{bmatrix} \exp j\delta_k & 0 \\ 0 & \exp j(-\delta_k) \end{bmatrix} \quad (8)$$

其中, δ 为光程差,它与复折射率 N 和厚度 d 的关系为

$$\delta = \frac{2\pi N d \cos \theta}{\lambda} \quad (9)$$

θ 为入射角,对于正入射, $\theta = 0$. 由式(5)~(9)可以得到多层膜总的反射率和透射率分别为

$$R = \left| \frac{E_{0,t}^-}{E_{0,t}^+} \right|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 \quad (10)$$

$$T = \left| \frac{E_{m+1/m,t}^+}{E_{0,t}^+} \right|^2 = \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \quad (11)$$

对于 HgCdTe/CdZnTe 结构的碲镉汞外延材

料,衬底 CdZnTe 的厚度一般约为 1 mm 左右,该厚度远大于光源的相干长度,且禁带宽度大于红外光谱仪测试波段的光子能量,因此,光在衬底中的传播只需要考虑光波强度的叠加. 由图 1 可以得到,光通过外延层和衬底后总的透射率为

$$T_{\text{total}} = \frac{T_a^+ (1-H) T_b^+}{1-R_a^- R_b^+ (1-H)} \quad (12)$$

T_a^+ 和 R_a^- 可以运用式(5)~(11)计算, T_b^+ 和 R_b^+ 可以由衬底的折射率求出. H 为外延层表面光波的散射损失.

3 结果与讨论

图 2 为 LPES428 原生片和 B^+ 注入后的红外透射谱. 由图 2 可见液相外延 HgCdTe/CdZnTe (LPES428) 原生片的红外透射光谱的吸收边陡峭,最大透射率近 60%,且有明显的干涉条纹,说明该样品纵向组分梯度小,晶体质量好,并具有平滑的界面和表面. 同时也可以看到,在小于 1400 cm^{-1} 时,该样品离子注入后的红外透射光谱与原生片的透射光谱有很大的区别. 离子注入的红外透射率先随波数的减小而增加,然后则减小,但干涉峰间距几乎没有变化. 离子注入后透射率随波数的变化与离子注入在 HgCdTe 样品表层形成的高电子浓度有直接的关系. 高的电子浓度将增大介电常数的低频行为对介电常数的贡献,从而影响该薄层的折射率和消光系数,最终导致透射率的变化.

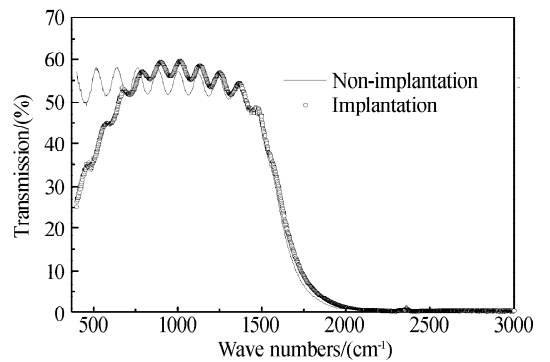


图2 LPES428 原生片和离子注入后的红外透射谱
Fig. 2 Infrared transmission spectra of LPES428 as-grown and after implanted

离子注入 HgCdTe 的红外透射光谱的计算机模拟是运用前面建立的多层模型和膜系传递矩阵,通过调整相关参数使 χ^2 达到最小值

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n (T_{\text{meas}} - T_{\text{calc}})^2 \quad (13)$$

T_{meas} 和 T_{calc} 分别为实验测量的透射率和理论计算的透射率, n 为测试的数据点数. 数值计算所采用的拟合方法为非线性最小二乘法 (Marquadt 算法). 图 3 给出了 LPES428 离子注入样品的实验透射光

谱和最佳拟合得到的透射率理论计算曲线. 可见实验曲线能够在理论上很好地再现, 这说明所建立的多层模型和理论方法的适用性和正确性. 表 1 给出了与图 3 所对应的最佳拟合参量.

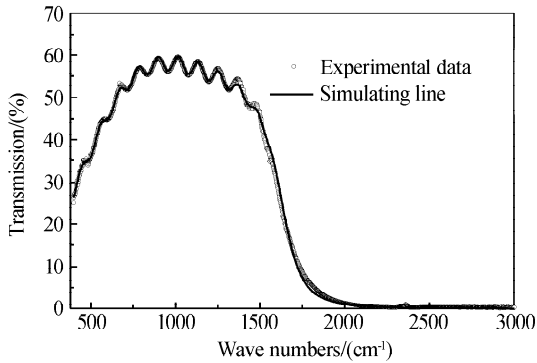


图 3 LPES428 离子注入样品的红外透射谱及理论拟合曲线
Fig. 3 Infrared transmission spectra of implanted LPES428 and theoretical fitting curve

表 1 图 3 中红外透射谱的最佳拟合参数

n_{\max} (10^{17} cm^{-3})	R_p / μm	ΔR_1 / μm	ΔR_2 / μm	τ_n (10^{-14} s)
9.20	0.474	0.223	0.155	3.03

图 4 则给出了最佳拟合条件相对应的自由载流子浓度以及运用 Trim 程序计算的 B⁺ 浓度的纵向分布. 可见, 与 B⁺ 浓度的分布相比, 自由载流子浓度分布更向深度方向延伸, 此说明注入的 B⁺ 的电活性并不是形成施主掺杂的主导因素, 而离子注入产

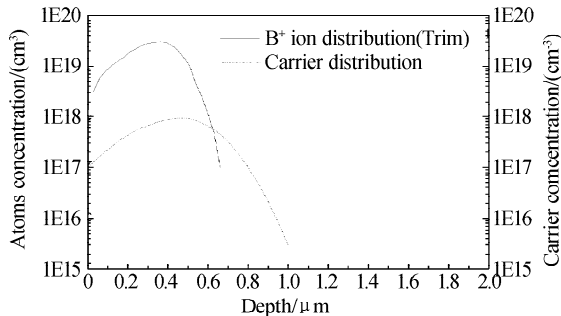


图 4 离子注入 LPES428 样品的 B⁺ 及载流子纵向分布
Fig. 4 Longitudinal distributions of B⁺ and carriers of implanted LPES428

生的辐射损伤将与施主浓度直接相关, 这与运用微分 Hall 法测定的结果是一致的. 另一方面, 也可以看到自由载流子浓度小于掺杂 B⁺ 浓度, 这与 Destefanis 运用微分 Hall 法所给出的结果也是一致的^[1]. Leveque 等发现这是由于大剂量离子注入 HgCdTe 所形成的结构缺陷把 Fermi 能级钉扎在导带内的缘故^[7]. 假定离子注入层为简并半导体, 导带底为零点, 则

$$E_F \left(1 + \frac{E_F}{E_G}\right) = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3} \eta^2}{2m_n^*} \quad (14)$$

E_F 和 E_G 分别是 Fermi 能级和禁带宽度, η 为 Plank 常数. 对于本工作的离子注入条件(能量为 180 keV,

剂量为 $10^{15}/\text{cm}^2$), 运用图 4 中载流子浓度分布的峰值浓度 $n = 9.20 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 、 $E_G = 0.184 \text{ eV}$ 及 $m_n^* = 0.0134m_0$, 可以得到 $E_F = 144 \text{ meV}$. Leveque 等证实了随注入剂量的增加, 其 Fermi 能级则更加靠近导带底, 从而使载流子浓度随注入剂量的增加而下降. 另外, 根据表 1 中的拟合数据以及迁移率与电子散射时间的关系 ($\mu_n = q\tau_n/m_n^*$), 可得到载流子迁移率为 $3.97 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$. 为了更好地与微分 Hall 法测定的结果比较, 运用下面公式可得到注入后碲镉汞材料的面载流子浓度

$$n_s = \int_0^d n(x) dx$$

d 为了注入层的厚度. 对于 B⁺ 注入碲镉汞而言, 面载流子浓度在 10^{13} cm^{-2} 到 10^{14} cm^{-2} 数量级^[1,7], 而在本实验条件下, 可以获得面载流子浓度为 $4.14 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 可见这个结果和微分 Hall 法测定是一致的, 这也说明本工作所建立模型的合理性.

图 5 给出了 HgCdTe 样品 LPES428 离子注入前后折射率和消光系数随深度的变化关系. 图 5 中的数据均为最佳拟合条件下的折射率和消光系数, 且入射光频率为 600 cm^{-1} . 由于 HgCdTe 原生片在近表层的组分梯度很小, 因此, 原生片的折射率近似为常数, 且消光系数接近于零. 离子注入后, HgCdTe 外延材料表层的折射率和消光系数均发生了很大变化, 并且与载流子浓度的纵向分布直接相关. 因此, 由式(1)~(3)可知, B⁺ 注入 HgCdTe 导致红外透射率变化的根本原因是注入层的高载流子浓度的等离子效应改变了该层的折射率和消光系数.

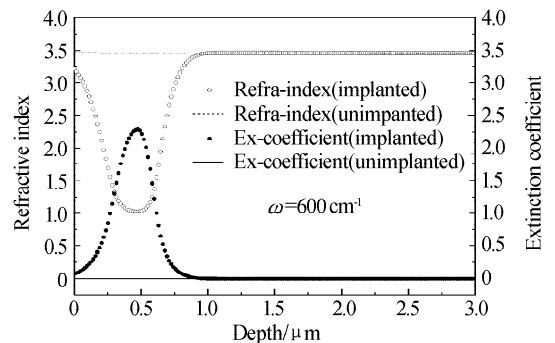


图 5 LPES428 样品离子注入区内折射率和消光系数分布
Fig. 5 Refractive index and extinction coefficient distributions in B⁺ implantation zone of LPES428 sample

4 结论

本文基于自由载流子的等离子效应, 运用多层模型和膜系传递矩阵以及非线性二乘法模拟了 B⁺ 注入碲镉汞外延材料的红外透射光谱. 结果表明, B⁺ 注入碲镉汞外延材料的红外透射光谱能够很好的理论再现, 同时, 根据拟合结果获得了结区的自由载流子浓度分布、迁移率、面自由载流子浓度以及折

射率和消光系数等相关参数。这些参数与微分 Hall 法测试的结果是吻合的,这表明红外光谱的计算模拟是表征离子注入半导体材料光电特性的一种非常简捷、有效和无损伤的测试方法,可以用来对碲镉汞器件的 B⁺ 离子注入工艺进行质量监控。

参考文献

- 1 Desterfanis G L. Electrical doping of HgCdTe by ion implantation and heat treatment. *Journal of Crystal Growth*, 1988, **86**:700~722
- 2 Declémy A, Renault P O. Characterization by diffuse X-ray scattering of damage in ion-implanted HgCdTe. *Journal of Crystal Growth*, 1996, **161**:139~143
- 3 Margalit S, Nemirovsky Y, Rotstein I. Electrical properties of ion-implanted layers in HgCdTe. *J Appl Phys*, 1979, **50**(10):6386~6389
- 4 Herber Engstrom. Infrared reflectivity and transmissivity

- of boron-implanted, laser-annealed silicon. *J Appl Phys*, 1980, **51**(10):5245~5249
- 5 沈学础. 半导体光学性质. 北京: 科学出版社, 1992. 21~25
Shen X C. Optical Properties of Semiconductors. Beijing: Science Press, 1992. 21~25
 - 6 林永昌, 卢维强. 光学薄膜原理. 北京: 国防工业出版社, 1990. 32~34
Lin Y C, Lu W Q. Principle of optical films. Beijing: National Defense Industry Press, 1990. 32~34
 - 7 Leveque P, Declémy A, Renault P O. Influence of extended structural defects on the effective carrier concentration of p-type Hg_{0.78} Cd_{0.22} Te implanted with aluminium ions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 2000, **168**:40~46

Infrared Transmission Spectroscopy of B⁺ implanted HgCdTe Epilayers

Wang Qingxue, Wei Yanfeng, Zhu Jianmei, Yang Jianrong, He Li
Research Center for Advanced Materials and Devices, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083

Received date: 2004-06-22

Abstract The calculation method of infrared transmission spectroscopy of boron-implanted HgCdTe epilayers was proposed based on multilayer model, transfer matrix and nonlinear least squares method. The results show that the transmission spectra of HgCdTe epilayers can be fitted very well by the theoretical calculation curves. By fitting, the carrier concentration, the mobility, the sheet carrier concentration, the refractive index and the extinction coefficient in B⁺ implanted zone are obtained. These parameters are consistent with those obtained from different Hall measurement before. The effect of B⁺ implantation on the transmission spectra of HgCdTe epilayers mainly comes from the changes of the refractive index and the extinction coefficient of HgCdTe material in B⁺ implanted zone.

Keywords Implantation; HgCdTe epilayers; Infrared spectroscopy; Carrier concentration



Wang Qingxue was born in 1977, in Hebei Province. He received the M. S. degree of Materials Science and Engineering in Wuhan University of Technology in 2002. Now he is a doctoral candidate in the research center for advanced materials and devices of Shanghai Institute of Technical Physics. He is engaged in the research of high resolution X-ray diffraction and infrared spectroscopy for HgCdTe semiconductor materials.