

## 液相外延 HgCdTe 薄膜组分均匀性对器件响应光谱的影响

崔宝双, 魏彦锋, 孙权志, 杨建荣

(中国科学院上海技术物理研究所 红外成像材料与器件重点实验室, 上海 200083)

**摘要:** 研究了 HgCdTe 液相外延薄膜的组分均匀性对器件响应光谱的影响。提出了一种计算 HgCdTe 红外探测器响应光谱的方法, 考虑了 HgCdTe 液相外延薄膜的纵向组分分布和横向组分波动, 以及光在器件各层结构中的相干、非相干传输。使用该方法计算了响应光谱的峰值响应率和截止波长随着液相外延 HgCdTe 的互扩散区厚度  $\Delta z$  和组分均方差  $\sigma$  的变化规律。结果表明: 对于一般的 HgCdTe 外延薄膜,  $\sigma$  小于 0.002, 不需要考虑横向组分波动的影响。同时计算了峰值响应率和黑体响应率随着液相外延 HgCdTe 的总厚度的变化规律, 可以得到最佳的吸收区厚度。

**关键词:** HgCdTe 液相外延薄膜; 响应光谱; 纵向组分分布; 横向组分波动

**中图分类号:** TN214   **文献标志码:** A   **文章编号:** 1007-2276(2013)04-0845-05

## Effect of composition ununiformity of LPE HgCdTe film on response spectral of device

Cui Baoshuang, Wei Yanfeng, Sun Quanzhi, Yang Jianrong

(Key Laboratory of Infrared Imaging Materials and Devices, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

**Abstract:** The effect of composition ununiformity of LPE HgCdTe film on spectral response of device was studied. A new method was proposed to calculate the spectral response of HgCdTe IR detector. This method considered longitudinal composition distribution and transverse composition ununiformity in LPE HgCdTe film. The coherent and incoherent light transmission among the device was also included. Using this method, the variation law of peak responsibility of spectral response and cutoff wavelength with compositional diffusion width  $\Delta z$  and transverse composition deviation  $\sigma$  of LPE HgCdTe film was calculated. The result indicates that for common LPE HgCdTe film, whose  $\sigma$  is less than 0.002, the influence of transverse composition ununiformity on spectral response can be neglected. The changes of peak responsibility and black body responsibility with thickness of LPE HgCdTe film were also calculated. The optimum thickness can be obtained.

**Key words:** HgCdTe LPE film; response spectral; longitudinal composition distribution; transverse composition ununiformity

收稿日期: 2012-08-09; 修订日期: 2012-09-09

基金项目: 国家自然科学基金(60876012)

作者简介: 崔宝双(1987-), 女, 硕士生, 主要从事 HgCdTe 红外材料与器件特性方面的研究。Email: cbsshuang@gmail.com

导师简介: 魏彦锋(1971-), 男, 研究员, 博士生导师, 博士, 主要从事红外半导体材料与器件物理方面的研究。

Email: yfwei@mail.sitp.ac.cn

## 0 引言

红外探测技术在工业生产、环境监测和国防等领域有着重要的应用<sup>[1-2]</sup>。三元 II-VI 族化合物碲镉汞 HgCdTe 的禁带宽度对应着红外波段,是一种重要的红外探测器材料。近年来发展的 HgCdTe 红外焦平面探测器的制备需要大面积、组分均匀的 HgCdTe 外延薄膜材料,液相外延是目前最为成熟的 HgCdTe 薄膜生长技术之一<sup>[3]</sup>。但是液相外延方法生长的 HgCdTe 薄膜存在横向组分波动和纵向组分梯度<sup>[4]</sup>,横向组分波动影响光敏元的均匀性,纵向组分梯度会产生内建电场,会对器件的光电特性产生影响<sup>[5]</sup>。响应光谱是评价器件性能的重要依据。因此,研究液相外延 HgCdTe 薄膜组分均匀性对器件响应光谱的影响具有重要的意义。

已有学者对吸收区为线性组分分布的 HgCdTe 探测器的响应光谱进行了研究,讨论了组分梯度、内建电场、表面复合速率等参数对响应光谱的影响<sup>[5]</sup>。但是, HgCdTe 液相外延薄膜实际的组分分布并不是线性的<sup>[4]</sup>,需要考虑光在器件中传输的干涉效应。

Hougen、Rosenfeld 和王庆学等人先后建立了各自的 HgCdTe 液相外延薄膜组分分布的模型,通过拟合红外透射谱可以给出材料的纵向组分分布<sup>[6-7]</sup>。其中,王庆学的计算使用多层模型和传递矩阵,考虑了薄膜的干涉效应<sup>[7]</sup>。文中采用王庆学提出的组分分布的模型,计算液相外延 HgCdTe 光伏器件的响应光谱。计算中考虑了光在器件各个结构中的相干和非相干传输,考虑了纵向组分分布引起的内建电场和载流子的漂移、扩散过程,用数值方法求解载流子的一维连续性方程,由此求出器件的响应光谱。分析液相外延 HgCdTe 薄膜组分均匀性,包括横向组分波动和纵向组分梯度,对器件响应光谱的影响。

## 1 理论模型

图 1 是背照射式的 n-on-p 型光伏探测器的结构示意图。计算器件响应光谱的过程为:计算 HgCdTe 薄膜中的由光产生的少数载流子(少子)的产生速率;由少子的连续性方程计算出少子浓度分布和少子电流密度;由电流密度计算出响应率。下面简述计算过程。

首先计算 HgCdTe 薄膜中的光生少子产生率。在探测器工作的红外波段,器件的减反层、衬底、钝化层可以认为对光没有吸收。只需要考虑光在 HgCdTe 层中的吸收。减反层、HgCdTe 层以及钝化层的厚度小于光的相干长度,光在其中的传输是相干的;衬底的厚度通常在 100 μm 以上,大于光源的相干长度,光在其中的传输是非相干的。

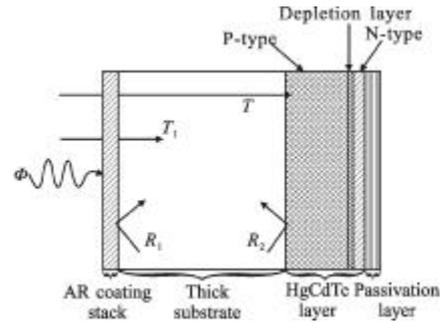


图 1 背照射式探测器的结构

Fig.1 Structure of back-illuminated detector

先讨论光的相干传输。具有组分分布的 HgCdTe 液相外延薄膜可以看做是组分不同的单层膜构成的多层膜系。电磁波在多层膜中的相干传输可以用层矩阵来描述<sup>[8]</sup>,多层薄膜的层矩阵与材料的光学常数有关,减反层、衬底、钝化层的光学常数可以从参考文献[9]中查到, HgCdTe 的光学常数可以从参考文献[6,10]中查到。多层膜入射光电场强度、反射光电场强度和出射光电场强度的关系可以用层矩阵表示出来。由多层膜的层矩阵求出各层薄膜中的电场,电磁波能量的时间平均值为:

$$\bar{S} = \varepsilon c |E \times H| / 2 \quad (1)$$

式中:  $\varepsilon$  为介电常数;  $c$  为光速;  $E$  和  $H$  分别为电磁波的电场强度和磁场强度。假设一个光子产生一个电子空穴对,所以少子的产生率为:

$$G = \frac{1}{E_p} \frac{d\bar{S}}{dz} \quad (2)$$

式中:  $E_p$  为单光子能量;  $z$  为薄膜生长方向的坐标。

由于空气、减反层和衬底之间的界面反射,入射光从减反层表面传输到 HgCdTe 表面时会有能量的损失。为了求出光传输到 HgCdTe 表面的强度,需要计算图 1 中的透射率  $T$ 。对于光的非相干传输,只需要考虑光强的叠加:

$$T = T_1 + T_1 R_2 R_1 + T_1 R_2 R_1 R_2 R_1 + T_1 R_2 R_1 R_2 R_1 R_2 R_1 + \dots = \frac{T_1}{1 - R_1 R_2} \quad (3)$$

计算  $T_1$  和  $R_1$  时,将空气和衬底看作半无限介质,使用层传输矩阵计算。

上面的计算可以得到薄膜中的少子产生率,再考虑图 1 中 P 区、N 区和耗尽区构成的一维 PN 结模型,过剩少子满足连续性方程和边界条件<sup>[11]</sup>,用数值方法求出 P 区(N 区)的过剩少子浓度分布和电子电流密度  $J_n|_{z=d}$ (空穴电流密度  $J_p|_{z=d+W}$ )。总电流密度为:

$$J = J_n|_{z=d} + J_p|_{z=d+W} + J_{scr} \quad (4)$$

其中,空间电荷区的电流密度:

$$J_{scr} = q \int_d^{d+W} G(z) dz \quad (5)$$

求解连续性方程时需要用到材料的电学参数,其中,少子扩散长度  $L$  和少子寿命  $\tau$  可以用多种实验方法进行测量,其他参数可以由这两个参数求出。

最后计算响应光谱。探测器的单色响应率为:

$$R_i = \eta(\lambda) q \lambda / hc, \quad \eta = I / qA\Phi = J / q\Phi \quad (6)$$

式中:  $h$  为普朗克常数;  $c$  为光速;  $\Phi$  为入射光通量,单色响应率和波长的关系即为响应光谱。

以上是计算 HgCdTe 光伏红外探测器响应光谱的模型,下面利用该模型分析液相外延 HgCdTe 薄膜材料组分均匀性对器件响应光谱的影响。

## 2 结果与讨论

液相外延 HgCdTe 薄膜在生长方向( $z$  方向)上的 Cd 组分分布  $x$  可以表示为<sup>[7]</sup>:

$$x(z) = X_s + S(d-z) + (1 - X_s - Sd)(1 - (\text{erf}(2z/\Delta z))^3) \quad (7)$$

式中:  $z$  为距离衬底的距离;  $X_s$  与薄膜表面组分有关;  $d$  为外延层总厚度;  $S$  为组分梯度;  $\text{erf}$  为误差函数;  $\Delta z$  为互扩散区宽度。通过拟合红外透射光谱获得的液相外延 HgCdTe 组分分布参数的精度如下<sup>[12]</sup>:  $X_s$  为  $\pm 0.0015$ ,  $S$  为  $\pm 5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $d$  和  $\Delta z$  为  $\pm 0.5 \mu\text{m}$ 。图 2 是根据公式(7)计算的 HgCdTe 液相外延薄膜的纵向组分分布。

HgCdTe 的禁带宽度  $E_g$  与 Cd 组分有关,因此 HgCdTe 液相外延薄膜在  $z$  方向上的组分分布会引起  $E_g$  在  $z$  方向上的变化并会产生内建电场  $E^{[13]}$ :

$$E = \frac{1}{q} \frac{dE_g}{dz} \quad (8)$$

式中:  $q$  为单位电荷。内建电场会影响器件中少子的漂移运动。在计算响应光谱的过程中要把内建电场这个参数考虑进去。

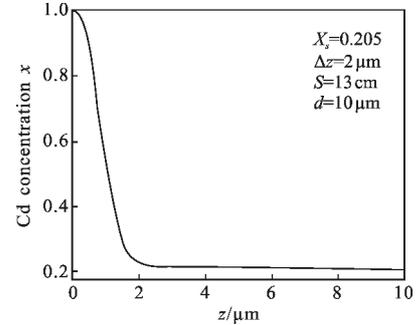


图 2 HgCdTe 液相外延薄膜的纵向组分分布

Fig.2 Longitudinal distribution of Cd concentration in LPE HgCdTe film

图 3 是液相外延 HgCdTe 的互扩散区厚度  $\Delta z$  对响应光谱的影响。由于讨论的是  $\Delta z$  的影响,所以材

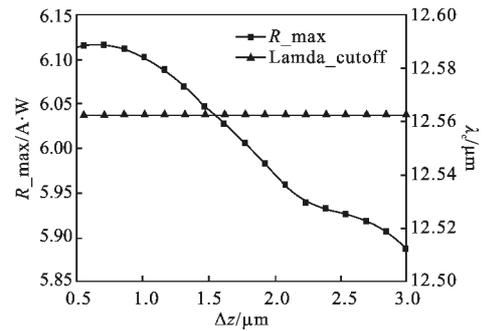


图 3 液相外延 HgCdTe 的互扩散区厚度  $\Delta z$  对响应光谱的峰值响应率  $R_{max}$  和截止波长  $\lambda_c$  的影响

Fig.3 Effect of compositional diffusion width  $\Delta z$  of LPE HgCdTe film on the peak responsivity  $R_{max}$  and cutoff wavelength  $\lambda_c$  of spectral response

料和器件的其他参数固定,少子扩散长度  $L_n=20 \mu\text{m}$ ,少子寿命  $\tau_n=0.2 \mu\text{s}$ ,  $X_s=0.205$ ,  $S=13 \text{ cm}^{-1}$ ,  $d=10 \mu\text{m}$ 。因为对于器件的响应光谱,最关心的是其峰值响应率  $R_{max}$  和截止波长  $\lambda_c$ ,所以下面讨论的是  $\Delta z$  对  $R_{max}$  和  $\lambda_c$  的影响。因为  $\Delta z$  一般为  $2 \mu\text{m}$ ,所以图 4 中的曲线是  $\Delta z$  为  $0.5 \sim 3 \mu\text{m}$  时,理论计算响应光谱的  $R_{max}$  和  $\lambda_c$ 。可以看到,  $R_{max}$  随着  $\Delta z$  的增加而减小,而  $\lambda_c$  基本没有变化。一方面互扩散区的 Cd 组分大,吸收系数大,吸收的光子多,外量子效率高;另一方面互扩散区厚度增加,则在互扩散区的内建电场变小,但是存在内建电场的区域变大。互扩散区对

峰值响应率的影响是多方面的,在图 3 条件下,互扩散区的厚度增加,峰值响应率减小。根据计算时设定的波长步长,互扩散区厚度的变化引起截止波长  $\lambda_c$  的变化小于  $0.14 \mu\text{m}$ 。因为,液相外延材料生长完成后通常要经过退火处理,退火过程会引起衬底与外延层的互扩散,导致  $\Delta z$  增加,因此,在材料处理过程中要考虑退火对器件响应率的影响。

以组分分布为  $X_s=0.205, S=13 \text{ cm}^{-1}, \Delta z=2 \mu\text{m}, d=10 \mu\text{m}$  为例。由于互扩散区厚度的误差( $\pm 0.5 \mu\text{m}$ )引起的峰值响应率的最大相对误差为 1.9%,截止波长的误差小于  $0.14 \mu\text{m}$ 。

图 4 是液相外延 HgCdTe 薄膜的厚度对响应光谱的影响。其他参数为少子扩散长度  $L_n=20 \mu\text{m}$ ,少子寿命  $\tau_n=0.2 \mu\text{s}, \Delta z=2 \mu\text{m}, X_s=0.205, S=13 \text{ cm}^{-1}$ 。因为在实际测试中,测量器件的黑体响应率(或积分响应率)是普遍采用的方法,所以,这里同时用黑体响应率来评价 HgCdTe 薄膜的厚度对响应光谱的影响,并寻求最佳厚度。假设黑体温度为 500 K,探测器工作温度为 77 K。黑体响应率  $R_{bb}$  为:

$$R_{bb} = \frac{\int_0^{\infty} P_{\lambda}(\lambda) R(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} P_{\lambda}(\lambda) d\lambda} \quad (9)$$

式中:  $P_{\lambda}(\lambda)$  为黑体的相对光谱分布;  $R(\lambda)$  为器件的单一响应率。

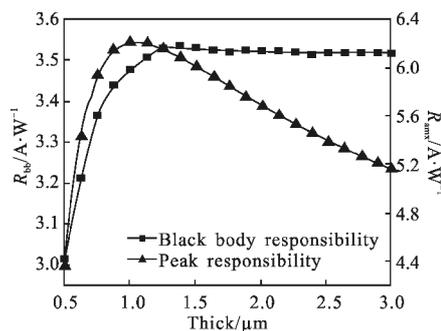


图 4 液相外延 HgCdTe 的厚度对黑体响应率  $R_{bb}$  和响应光谱的峰值响应率  $R_{max}$  的影响

Fig.4 Effect of width of LPE HgCdTe film on the black body responsibility  $R_{bb}$  and spectral response's peak responsibility  $R_{max}$

可以看到,黑体响应率随着 HgCdTe 薄膜厚度的增加先变大,后变小。峰值响应率随着 HgCdTe 薄

膜厚度的增加先变大,然后缓慢变小。若厚度太小,则吸收的光少,产生的光电流小,响应小;若厚度太大,则产生的光生少子不能扩散到 PN 结,不能形成光电流,响应也会变小。通过黑体响应率和峰值响应率随 HgCdTe 薄膜厚度的变化规律,可以得到薄膜的最佳厚度。以图 4 为例,最佳厚度在  $10 \mu\text{m}$  左右。

HgCdTe 外延薄膜的横向组分波动符合正态分布<sup>[4]</sup>:

$$f(x) = \frac{\exp(-[x-x(z)]^2/(2\sigma^2))}{\sqrt{2\pi} \sigma} \quad (10)$$

式中:  $f(x)$  为组分  $x$  出现的可能性;  $x(z)$  为组分平均值;  $\sigma$  为在  $z$  平面上组分偏离程度的均方差。因此外延 HgCdTe 材料的吸收系数为:

$$\alpha_{ep} = \int_{x-2\sigma}^{x+2\sigma} \alpha(x) f(x) dx \quad (11)$$

可以看到, HgCdTe 外延薄膜的横向组分波动主要影响材料的吸收系数。在计算器件的响应光谱时,若使用外延薄膜的吸收系数  $\alpha_{ep}$ ,则可以研究横向组分波动对器件响应光谱的影响。

图 5 是 HgCdTe 外延薄膜的横向组分均方差  $\sigma$  对响应光谱的影响。其他参数为  $X_s=0.205, \Delta z=2 \mu\text{m}, S=13 \text{ cm}^{-1}, d=10 \mu\text{m}$ 。可以看到,峰值响应率随着  $\sigma$  的增加而减小,而截止波长随着  $\sigma$  的增加而增加。对于一般的 HgCdTe 外延薄膜,  $\sigma$  小于 0.002, 峰值响应率的最大相对误差为 1.12%, 截止波长的变化小于  $0.14 \mu\text{m}$ 。可以看到,由横向组分波动引起的响应光谱的变化很小。在模拟和计算的时候可以不用考虑横向组分波动的影响。

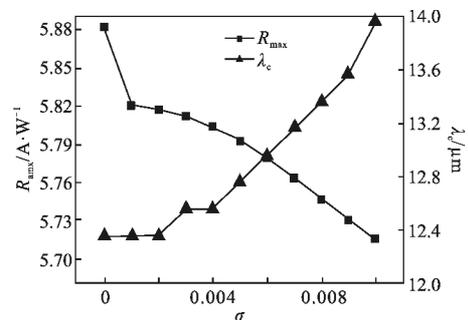


图 5 液相外延 HgCdTe 的横向组分均方差  $\sigma$  对响应光谱的峰值响应率  $R_{max}$  和截止波长  $\lambda_c$  的影响

Fig.5 Effect of transverse composition deviation  $\sigma$  of LPE HgCdTe film on the peak responsibility  $R_{max}$  and cutoff wavelength  $\lambda_c$  of spectral response

### 3 结 论

文中研究了液相外延 HgCdTe 光伏探测器的响应光谱。所使用的计算模型考虑了 HgCdTe 吸收区的纵向组分分布和横向组分波动,以及光在探测器各个结构之间的相干、非相干效应,用数值方法求解载流子的一维连续性方程,由此计算出器件的响应光谱。使用文中的计算模型,计算了液相外延 HgCdTe 的组分均匀性对探测器响应光谱的影响。由计算结果可以得知:响应光谱的峰值响应率随着互扩散区厚度  $\Delta z$  的增加而减小;截止波长随着  $\Delta z$  的变化小于计算时设置的波长步长  $0.14 \mu\text{m}$ ;黑体响应率和峰值响应率随着 HgCdTe 薄膜厚度的增加,先变大,后变小,由此可以得到最佳的 HgCdTe 厚度。横向组分波动的影响为,峰值响应率随着横向组分波动  $\sigma$  的增加而减小,而截止波长随着  $\sigma$  的增加而增加。对于一般的  $\sigma$  小于 0.002 的 HgCdTe 外延薄膜,峰值响应率的最大相对误差为 1.12%,截止波长的变化小于  $0.14 \mu\text{m}$ 。可以不考虑横向组分波动的影响。

### 参考文献:

- [1] Ding Quanxin, Liu Hua. Current development and thought on simulation, test and evaluation of the infrared imaging System [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2009, 39(5): 753-758. (in Chinese)  
丁全心, 刘华. 红外成像系统仿真、测试与评价的发展与思考[J]. *红外与激光工程*, 2009, 39(5): 753-758.
- [2] Ding Ruijun, Ye Zhenhua, Zhou Wenhong, et al. Review of two-color infrared focal plane arrays [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2008, 37(1): 14-17. (in Chinese)  
丁瑞军, 叶振华, 周文洪, 等. 双色红外焦平面研究进展 [J]. *红外与激光工程*, 2008, 37(1): 14-17.
- [3] Wei Yanfeng, Chen Xinqiang, Cao Wumei. Growth and defects characterization of HgCdTe film grown by LPE method [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2006, 35(3): 294-313. (in Chinese)  
魏彦锋, 陈新强, 曹妩媚. HgCdTe 液相外延薄膜生长及缺陷表征[J]. *红外与激光工程*, 2006, 35(3): 294-313.
- [4] Liu Kun, Chu Junhao, Li Biao, et al. Measurement of composition in  $\text{Hg}_{1-x}\text{CdxTe}$  epilayers [J]. *Appl Phys Lett*, 1994, 64(21): 2818-2820.
- [5] Rosenfeld D, Garber V, Bahir G. Quantum efficiency and spectral response of compositionally graded HgCdTe P-n heterojunction photodiodes [J]. *Appl Phys*, 1994, 76(7): 4399-4406.
- [6] Hougen C A. Model for infrared absorption and transmission of Uquid-phase epitaxy HgCdTe [J]. *J Appl Phys*, 1989, 56(8): 3763-3766.
- [7] Wang Qingxue, Wei Yangfeng, Yang Jianrong, et al. Effect of LPE-HgCdTe composition ununiformity on infrared transmission spectra [J]. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2005, 26(5): 904-908. (in Chinese)  
王庆学, 魏彦锋, 杨建荣, 等. 液相外延 HgCdTe 薄膜组分均匀性对红外透射光谱的影响[J]. *半导体学报*, 2005, 26(5): 904-908.
- [8] Klein M V, Furtak T E. *Optics* [M]. 2nd ed. New York: Wiley, 1986: 295-300.
- [9] Palik E D. *Handook of Optical Constants of Solids* [M]. London: Academic Press, 1985: 415-619.
- [10] Finkman E, Schacham S E. The exponential optical absorption band tail of  $\text{Hg}_{1-x}\text{CdxTe}$  [J]. *J Appl Phys*, 1984, 56: 2896-2900.
- [11] Dieter K S. *Semiconductor Material and Device Characterization* [M]. 3rd ed. Canada: A Wiley-Interscience Publication, 2006: 441-444.
- [12] Gu Renjie, Zhang Chuanjie, Yang Jianrong, et al. Evaluation of the composition profile of HgCdTe LPE films by IR transmission spectrum[J]. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2008, 29(3): 534-538. (in Chinese)  
顾仁杰, 张传杰, 杨建荣, 等. HgCdTe 液相外延材料组分分布的红外透射光谱评价技术 [J]. *半导体学报*, 2008, 29(3): 534-538.
- [13] Donaldl L. Modeling of optical response in graded absorber layer detectors [J]. *Journal of Electronic Materials*, 2006, 35(6): 1423-1428.