

А. И. КОНДРИК, д. ф.-м. н. Г. П. КОВТУН

Дата поступления в редакцию
29.05 2003 г.

Украина, ННЦ «Харьковский физико-технический институт»
E-mail: kondrik@kipt.kharkov.ua

Оппонент д. ф.-м. н. Д. В. КОРБУТЯК
(ИФП им. В. Е. Лашкарёва, г. Киев)

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ДЕТЕКТОРОВ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

Результаты исследования могут служить ориентиром для разработчиков новых материалов семейства CdZnTe для детекторов ионизирующих излучений.

Полупроводниковые соединения с повышенной шириной запрещенной зоны, такие как CdTe и его соединения, могут рассматриваться в качестве перспективных материалов для детекторов радиационного излучения [1]. В таких детекторах для получения сигнала во внешней цепи носители заряда должны быстро двигаться в электрическом поле, а для получения линейного по энергии сигнала они не должны нести потери на пути к электродам. Это означает, что необходимо обеспечить максимально возможные значения подвижности μ электронов и дырок.

Для регистрации малых по величине сигналов необходимо иметь минимальные токи утечки при достаточно высоких приложенных к детекторам полях. Значит, детекторные материалы должны обладать высоким удельным сопротивлением ρ .

Нужные свойства могут быть получены в сложных соединениях, например, в тройных $A_xB_{1-x}C$. При разработке новых материалов важно знать, какое влияние могут оказывать на величины μ и ρ свойства матрицы, структурные дефекты и примесный состав. Наиболее быстрым и дешевым способом исследования такого влияния является метод компьютерного моделирования, основанный на апробированных физических моделях.

Целью данной работы являлось моделирование дрейфовой подвижности электронов и удельного сопротивления материалов типа $Cd_xZn_{1-x}Te$ в зависимости от величины x , а также примесного и дефектного состава, при комнатной температуре.

Для точного расчета подвижности в сложных соединениях можно численно решать кинетическое уравнение Больцмана с учетом реальной зонной структуры (см., например, [2]). Однако такой подход в случае широкозонных соединений является неоправданно усложненным. Поэтому вычисление подвижности проводилось в рамках приближения времени релаксации с учетом непараболичности и поправок на изменения ряда параметров матрицы при изменении x , а именно: параметра решетки, эффективной массы электронов проводимости, ширины запрещенной зоны, диэлектрической проницаемости,

плотности материала, а также величин, учитываемых при рассеянии на акустических и оптических колебаниях решетки. Модель, учитывающая изменения этих параметров при вычислении подвижности, впервые была разработана и применена авторами работы [3] для тройных соединений, состоящих из соединений типа $A_{III}B_V$. Полупроводники CdTe и ZnTe имеют такую же кристаллическую и аналогичную зонную структуру. Кроме того, подвижность в этих материалах определяется, в основном, теми же механизмами рассеяния. Таким образом, была написана компьютерная программа для вычисления μ и ρ в приближении времени релаксации, в которой автоматически вводились поправки на изменение вышеуказанных параметров в соответствии с физической моделью, подробно описанной в [3].

Применение модели работы [3] для соединения $Cd_xZn_{1-x}Te$ дало удовлетворительное совпадение величин подвижности с известными нам экспериментальными данными. При расчете подвижности учитывалось рассеяние на акустических и оптических фонах, ионизированных глубоких и мелких центрах, а также рассеяние в сплаве. Частота рассеяния на ионизированных примесях рассчитывалась в соответствии с известным приближением Брукса—Херринга [4], в которое было внесено некоторое дополнение. Кроме экранирования свободными носителями заряда, было введено дополнительное экранирование ионизированными глубокими центрами. Такая модель была предварительно апробирована на ряде эталонных образцов с известным составом и подвижностью, и во всех случаях наблюдалось лучшее совпадение с экспериментом, по сравнению с моделью Брукса—Херринга.

В качестве исходного материала был принят состав фоновых примесей в CdTe и CdZnTe, получаемый в современных технологиях выращивания [5]. Концентрация донорного центра хлора $N_D(Cl)=5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$; концентрация акцепторного дефекта замещения кадмия серебром $N_A(Ag_{Cd})=0,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; концентрация акцепторного дефекта замещения теллура мышьяком $N_A(As_{Te})=0,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; концентрация акцепторного дефекта замещения теллура фосфором $N_A(P_{Te})=0,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; концентрация вакансий кадмия $N_{DA}(V_{Cd})=1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, являющихся глубокими акцепторами; концентрация вакансий теллура $N_{DD}(V_{Te})=3,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, являющихся глубокими донорами. Концентрация глубокого

донора X , обеспечивающего полуизолирующие свойства [5, 6], была принята равной $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

Рассмотрение такого примесного состава с фиксированным положением примесных уровней, в принципе, является корректным для $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, по крайней мере, в диапазоне изменения $0,5 < x < 1$. Причина этого заключается в том, что соединения CdTe и ZnTe имеют примерно одинаковое положение валентной зоны и, следовательно, согласно правилу Хейнриха—Лангера [7], должны иметь те же значения энергий примесных уровней и для соединений CdZnTe .

На рис. 1 показана рассчитанная зависимость дрейфовой подвижности электронов проводимости в соединении $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ в зависимости от мольной доли CdTe при комнатной температуре. Верхняя ось отображает ширину запрещенной зоны E_{g0} , которая соответствует указанным значениям x при $T=0 \text{ К}$. Наблюдаемый минимум можно объяснить действием возмущения ΔV , вносимого соединением CdTe в периодический потенциал решетки ZnTe . Возмущение ΔV имеет вид потенциального барьера с величиной, равной разности электронных восприимчивостей соединений CdTe и ZnTe . При относительно малой доле CdTe возмущение ΔV вначале вызывает уменьшение подвижности в CdZnTe по сравнению с ZnTe . Затем μ увеличивается, когда на процессы рассеяния начинают влиять параметры CdTe , имеющего более высокую подвижность, чем ZnTe .

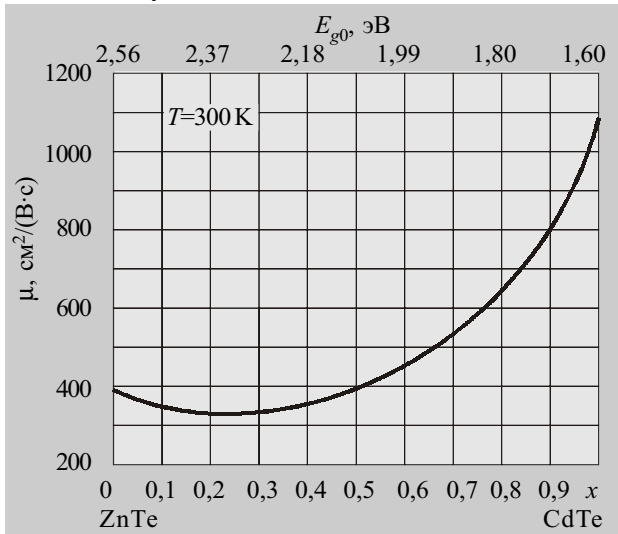


Рис. 1. Зависимость подвижности электронов проводимости в материале $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ от мольной доли CdTe

Из рис. 1 видно, что, согласно принятой модели, действие потенциального возмущения в сплаве должно приводить к заметному уменьшению подвижности электронов при изменении мольного содержания $y=1-x$ соединения ZnTe в пределах $0 < y < 0,2$. Такое уменьшение подвижности в соединении $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ накладывает ограничение на величину мольной доли ZnTe в тройном соединении. Из рисунка видно также, что содержание ZnTe при $y=1-x=0,2$ соответствует ширине запрещенной зоны $E_{g0}=1,8 \text{ эВ}$. С другой стороны, ранее было показано [8], что в соединении CdZnTe с шириной запрещенной зоны $E_{g0}=1,8 \text{ эВ}$ удельное сопротивление при комнатной температуре на два по-

рядка больше, чем в CdTe . Таким образом, уменьшение μ в какой то мере компенсируется значительным увеличением ρ .

В связи с этим представляет интерес исследование зависимости удельного сопротивления от величины x в тройных соединениях типа $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$. Для такого количественного исследования был выбран образец с легирующими добавками Cl и Cr , обеспечивающими полуизолирующие свойства [6, 8], при этом концентрация хлора была принята равной $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. На рис. 2 показаны результаты компьютерного моделирования ρ в зависимости от концентрации глубокого акцептора хрома N_{Cr} при различных значениях x . Моделирование проводилось для температуры 300 К .

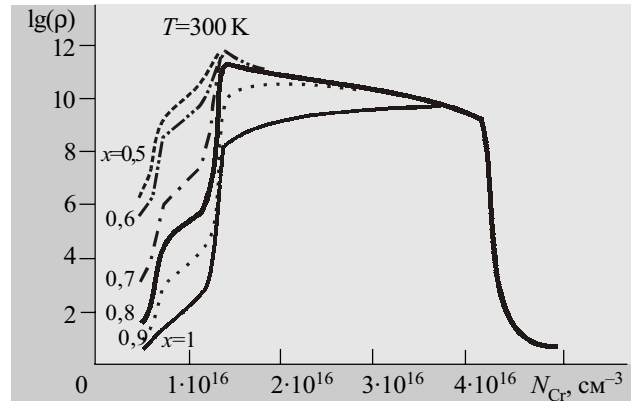


Рис. 2. Зависимости $\lg(\rho)$ ($\text{Ом}\cdot\text{см}$) от N_{Cr} при различных значениях мольного содержания CdTe (x)

Из рис. 2 можно видеть, что заметное увеличение удельного сопротивления до значения $10^{12} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ происходит только в диапазоне уменьшения величины x от 1 до 0,8. Величине $x=0,8$ соответствует $E_{g0}=1,8 \text{ эВ}$ (см. рис. 1). Дальнейшее уменьшение мольного содержания CdTe вплоть до $x=0,5$, которому соответствует увеличение E_{g0} до 2,1 эВ, практически не дает заметного изменения ρ .

Из рис. 1 можно видеть, что значения $E_{g0} > 2,1 \text{ эВ}$ соответствуют значениям $x < 0,5$, т. е. образцу CdZnTe с преобладающим содержанием соединения ZnTe , который характеризуется низкой подвижностью, что неизбежно должно отрицательно сказаться на детекторных свойствах материала. При концентрации хрома $N_{\text{Cr}}=1,41 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и $0,5 < x < 0,8$ имеется очень узкий пик для ρ (не показанный на рисунке) с максимумом $\sim 10^{13} \text{ Ом}\cdot\text{см}$. Однако на практике невозможно получить образец, однородный по объему, именно с таким сочетанием компенсирующих добавок, которые везде в точности соответствовали бы этому максимуму. В связи с вышеизложенным можно говорить о существовании ограничения на величину ρ , которая на практике для детекторных материалов CdZnTe не может превзойти величины $10^{12} \text{ Ом}\cdot\text{см}$. Можно также говорить о заведомой нецелесообразности разработки материалов с мольным содержанием CdTe , выходящим за пределы $0,8 < x < 0,9$.

Таким образом, материал $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$ является наиболее оптимальным с точки зрения его детекторных характеристик. По-видимому, заслуживает внимания также и материал $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$, имеющий бо-

лее высокую подвижность и высокое удельное сопротивление ($\sim 10^{10}-10^{11}$ Ом·см, см. рис. 1 и 2).

Приняв материал $Cd_{0,8}Zn_{0,2}Te$ в качестве основного, мы провели для него исследования трехмерных зависимостей μ и ρ от концентрации легирующих примесей Cr и Cl с тем, чтобы попытаться выявить возможную корреляцию между этими параметрами. Легирование именно хромом не является обязательным, просто его введение в модель означает введение в принципе любого другого глубокого акцептора (уровень которого расположен в середине или в верхней половине запрещенной зоны), удобно с точки зрения технологии выращивания. Легирование хлором является достаточно распространенным способом достижения полуизолирующего состояния материала.

Результаты моделирования приведены на рис. 3 и 4. Подобные исследования проводились ранее для материала CdTe [6]. Полученные здесь результаты качественно не отличаются от результатов работы [6], отличие заключается только в абсолютных значениях ρ и μ , поэтому мы здесь приводим их без обсуждения.

1. Основным механизмом рассеяния для материала $Cd_{0,8}Zn_{0,2}Te$ (помимо рассеяния в сплаве, которое отсутствует в CdTe) является рассеяние на полярных оптических фононах.

2. При комнатных температурах средняя частота рассеяния на ионизированных примесях в $Cd_{0,8}Zn_{0,2}Te$ значительно меньше, чем средняя частота рассеяния на полярных оптических фононах (и рассеяния в сплаве), поэтому подвижность слабо зависит от примесного состава (при условии однородного распределения ионизированных центров по объему материала).

3. На изменение величины подвижности оказывают влияние два противоположно направленных фактора: экранировка рассеивающих центров (в сторону увеличения) и концентрация ионизированных примесей (в сторону уменьшения). Области с максимальной подвижностью, как правило, являются низкоомными, если только здесь по какой-либо причине не происходит резкого увеличения концентрации ионизированных глубоких центров.

Из результатов 1 и 2 следует, что для исключения влияния электрически активных фоновых примесей переходных металлов, которые могут непреднамеренно вноситься в матрицу в процессе выращивания, достаточно концентрацию легирующих примесей, обеспечивающих полуизолирующие свойства, сделать на порядок большей. При условии однородного распределения легирующих примесей это не должно заметно повлиять на подвижность.

Из результата 3 и рис. 3, 4 следует также, что полуизолирующие материалы с максимальной подвижностью получаются при меньших концентрациях легирующей примеси хлора перед переходом материала в низкоомное состояние *n*-типа (область слева от хребта и в непосредственной близости от него). Из рис. 4 видно, что подвижность увеличивается при уменьшении концентрации хлора. Для обеспечения высокоомного состояния меньшая концентрация хлора возможна при уменьшении концентрации дефектов замещения, которые являются мелкими акцепторами. С другой стороны, хлор может образовывать комплексы с вакансиями кадмия, которые дают в запрещенной зоне мелкие акцепторные уровни и, как показывают вычисления, понижают ρ . Таким образом, большая концентрация хлора отрицательно сказывается как на величине μ , так и на величине ρ .

Результаты моделирования показывают также, что для материалов, получаемых без введения хлора, максимальная подвижность наблюдается при максимальной концентрации ионизированных глубоких центров, а такая их концентрация возможна при компенсации мелких фоновых примесей глубокими донорами.

Был проведен также сравнительный анализ величины удельного сопротивления, полученного в настоящей работе, и в модели, где учитывалось только изменение ширины запрещенной зоны [8]. Установлено, что в диапазоне $0,8 < x < 1$, помимо очевидного влияния изменения величины E_{go} , изменение остальных параметров существенно не влияет на значение ρ . В указанном диапазоне изменения x влияние на изменение подвижности оказывает изменение статической и динамической диэлектрической проницаемости, эффективной массы электронов проводимости, а

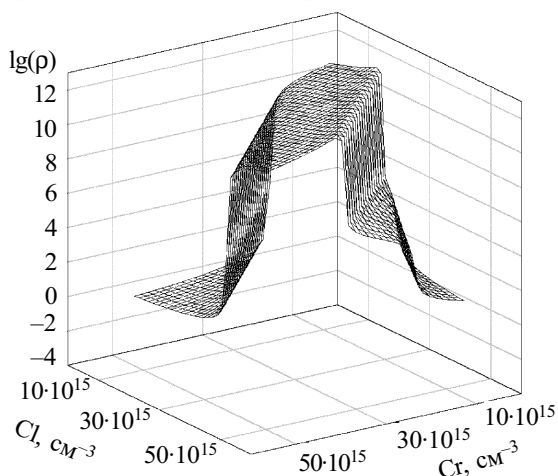


Рис. 3. Зависимость $lg(\rho)$ (Ом·см) от концентраций Cl и Cr

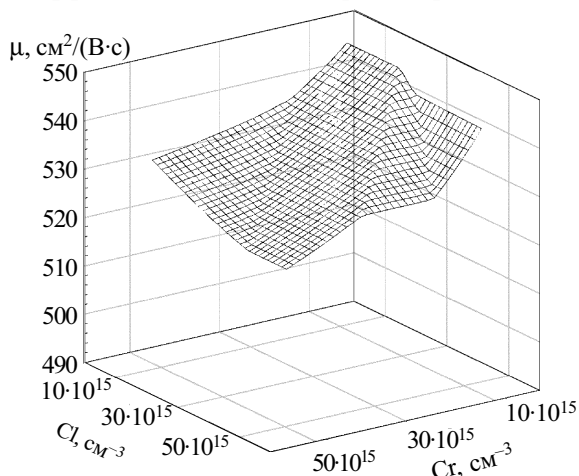


Рис. 4. Зависимость подвижности μ от тех же значений концентраций Cl и Cr, что и на рис. 3

также появление дополнительного механизма рассеяния в сплаве.

Таким образом, из проведенной работы можно сделать некоторые выводы.

Материалы $Cd_xZn_{1-x}Te$ при $0,8 < x < 0,9$ являются наиболее подходящими из семейства материалов $CdZnTe$ для детекторов радиационных излучений. При условии однородного распределения легирующих и фоновых примесей их концентрация не оказывает заметного влияния на величину μ , при этом полуизолирующие материалы с повышенным содержанием ионизированных глубоких центров должны иметь несколько более высокие значения подвижности.

Соответствие полученных результатов моделирования с известными нам обширными экспериментальными результатами дает основание считать, что имеется определенная ясность относительно оптимальных условий для достижения максимальных значений μ и ρ в материалах типа $CdZnTe$. В связи с этим в каждом конкретном случае выращивания можно попытаться выработать конкретные рекомендации относительно оптимального состава разрабатываемых детекторных материалов.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Корбутяк Д. В., Мельничук С. В., Корбут С. В., Борисюк М. М. Телурид кадмію: домашково-дефектні стани та детекторні властивості.— Київ: "Іван Федоров", 2000.
2. Krishnamurthy S., Sher A. Electron mobility in $Hg_{78}Cd_{0,22}Te$ alloy // J. Appl. Phys.— 1994.— Vol. 75, N 12.— P. 7904—7909.
3. Harrison J. W., Hauser J. R. Theoretical calculations of electron mobility in ternary III–V compounds // J. Appl. Phys.— 1975.— Vol. 47, N 1.— P. 292—300.
4. Brooks H. Theory of electrical properties of germanium and silicon // Adv. Electron. Electron Phys.— 1955.— Vol. 7.— P. 85—182.
5. Hofmann D. M., Stadler W., Christman P., Meyer B. K. Defects in $CdTe$ and $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.— 1996.— Vol. A380.— P. 117—120.
6. Datsenko O. A., Kondrik A. I. Electrophysical properties forecasting for $CdTe$ semiconductor materials depending on the impurity composition // Functional Materials.— 2001.— Vol. 8, N 3.— P. 1—6.
7. Langer J. M., Heinrich H. Deep-level impurities: a possible guide to prediction of band-edge discontinuities in semiconductor heterojunctions // Phys. Rev. Lett.— 1985.— Vol. 55, N 13.— P. 1414—1417.
8. Davydov L. N., Datsenko O. A., Kovtun G. P. et al. Numerical simulation of $CdZnTe$ semiconductor resistivity as a function of impurity composition // Functional Materials.— 2001.— Vol. 8, N 2.— P. 255—261.

Д. т. н. И. Е. МАРОНЧУК, к. т. н. В. В. КУРАК,
Е. В. АНДРОНОВА, Е. А. БАГАНОВ

Украина, Херсонский гос. технический университет
E-mail: vk_74@mail.ru

Дата поступления в редакцию
21.04 2003 г.

Оппонент к. т. н. В. А. ЗАВАДСКИЙ
(ОНМА, г. Одесса)

ВЫРАЩИВАНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР GaSb/InAs ЖИДКОФАЗНОЙ ЭПИТАКСИЕЙ БЕЗ РАСТВОРЕНИЯ ПОДЛОЖКИ

Модифицированный метод импульсного охлаждения раствора-расплава позволяет избежать растворения подложки InAs при контакте с жидкой фазой Ga+Sb.

В настоящее время основными методами получения гетероструктур в системе GaSb—InAs являются молекулярно-лучевая эпитаксия и осаждение из паров металлоорганических соединений [1]. Кристаллизация эпитаксиальных слоев при использовании этих методов происходит в сильно неравновесных условиях, что приводит к снижению структурного совершенства и, как следствие, к сравнительно низким характеристикам приборов, изготовленных на их основе.

Условия кристаллизации, наиболее близкие к равновесным, обеспечиваются методами жидкофазной эпитаксии [2, с. 118]. Однако выращивание гетероструктур GaSb/InAs из жидкой фазы сопряжено с рядом трудностей, связанных с наличием растворителя. Как показано в [3], подложка InAs при контакте с насыщенным раствором Sb в расплаве Ga является неустойчивой, что приводит к ее локальному рас-

творению, неконтролируемому составу кристаллизующегося эпитаксиального слоя и непланарности гетерограницы.

В этой связи целью данной работы является разработка технологических приемов, позволяющих исключить неконтролируемые процессы растворения подложки InAs при жидкофазной эпитаксии GaSb.

Выбор метода выращивания

Получение качественных эпитаксиальных слоев из жидкой фазы в системах, склонных к растворению материала подложки, возможно при использовании двух различных подходов. Первый заключается в обеспечении квазиравновесных условий кристаллизации при повышении стабильности подложки к действию растворителя за счет варьирования состава жидкой фазы. Так, добавление индия в раствор-расплав Ga+Sb уменьшает, но полностью не исключает растворение подложки [3]. При этом добавление мышьяка в жидкую фазу порядка 10^{-4} ат. доли при температуре 450°C обеспечивает устойчивость подложки к действию растворителя, однако приводит к кристаллизации четырехкомпонентного эпитаксиального слоя InGaAsSb. Следовательно, при реализации