

〈材料与器件〉

碲镉汞红外焦平面响应图“交叉线”特征起源探讨

孔金丞, 覃 钢, 秦 强, 李立华, 毛京湘
(昆明物理研究所, 云南 昆明 650223)

摘要: 对碲镉汞红外焦平面热响应图“交叉线”特征起源进行了研究。基于碲镉汞的闪锌矿结构晶体滑移系统理论, 讨论了不同滑移面与碲镉汞薄膜生长所用(111)B面和(211)B面交线的方向, 从晶格失配和应力释放的角度探讨了碲镉汞薄膜表面交叉线形貌与X射线衍射交叉线貌相的起源与几何结构, 分析了碲镉汞薄膜交叉线与材料晶体质量之间的关系, 探讨了碲镉汞红外焦平面热响应图交叉线特征的起源及其与器件性能的关系。
关键词: 碲镉汞; 晶格失配; 滑移系统; 残余应变; 交叉线
中图分类号: TN215, TN304 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-8891(2019)02-0101-06

Crosshatch Pattern on HgCdTe FPA Response Imaging

KONG Jincheng, QIN Gang, QIN Qiang, LI Lihua, MAO Jingxiang
(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: In this paper, we reviewed the crosshatch patterns commonly found on HgCdTe infrared FPA(focal plane array) response imaging, which were associated with the intersection between the (111) growth plane and each of the eight equivalent HgCdTe slip planes. Crosshatch patterns can also be observed using Nomarski micrograph and X-ray diffraction morphologies on a HgCdTe film surface. The schematic representation of the geometric relationship between crosshatch lines and the different directions of the CdZnTe substrate were demonstrated. The relationship between the crosshatch pattern morphology and crystallinity of HgCdTe films as well as the device performance were discussed.
Key words: HgCdTe, lattice mismatch, slip system, residual strain, crosshatch pattern

0 引言

碲镉汞红外探测器应用广泛, 满足 1~3 μm、3~5 μm 和 8~14 μm 三个大气窗口的红外探测。碲镉汞材料具有高量子效率的优势, 碲镉汞红外焦平面是红外光电系统中需求最为迫切、应用最为广泛的关键核心器件, 在高端红外探测领域一直占据着主导地位。在碲镉汞红外焦平面探测器组件的热响应和暗电流 Mapping 测试过程中的“交叉线”(Crosshatch)图样, 具有典型的模式和特点, 性能越好的探测器组件, “交叉线”图样越明显^[1-3]。本文针对碲镉汞红外焦平面响应图及暗电流测试“交叉线”特征的起源这一问题, 从碲镉汞材料的晶体滑移系统、外延材料与衬底之间的晶格失配与应力释放及对器件性能的影响等角度进行了探讨和分析。

1 “交叉线”图样的特征

在碲镉汞红外焦平面器件热响应或暗电流 Mapping 测试中测试结果有时会呈现出“交叉线”分布特征, 图 1 所示为昆明物理研究所采用生长在(111)B 碲锌镉衬底上的碲镉汞液相外延薄膜材料研制的中波红外焦平面探测器热响应图, 可以看出在响应图上有明显的 Crosshatch 特征, Crosshatch 交叉线之间的夹角为 60°。
采用液相外延(Liquid Phase Epitaxy, LPE)技术生长的碲镉汞薄膜样品在偏振显微镜下薄膜表面显微形貌也呈现出夹角为 60°的周期性排列的交叉线; 利用 X 射线衍射形貌(能反映出高密度位错形成的应力场)也可以观察到具有相同几何结构的交叉线周期性排列; 平行于衬底界面的失配位错也具有相同

收稿日期: 2018-11-12; 修订日期: 2018-11-29.
作者简介: 孔金丞(1979-), 男, 云南南华人, 研究员, 博士, 主要从事红外探测器材料与器件技术研究。E-mail: kongjincheng@163.com.

几何对称性。图 2 所示为昆明物理研究所在(111)B 碲镉汞衬底上采用 LPE 技术制备的碲镉汞薄膜表面显微形貌，表面存在明显的交叉线图案。

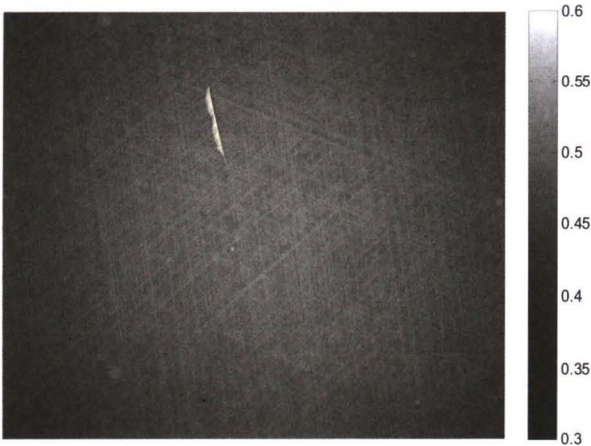


图 1 (111)面碲镉汞焦平面响应图

Fig.1 Responsivity mapping of a (111) HgCdTe IR FPA

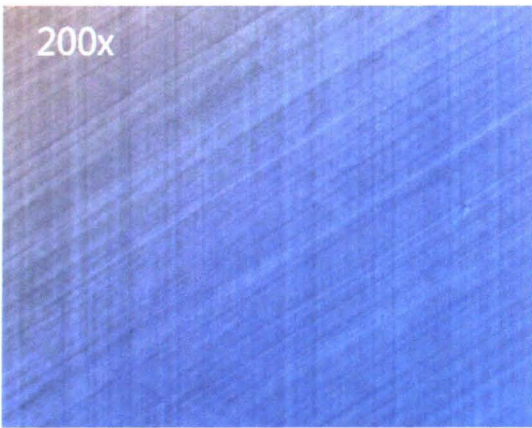


图 2 LPE 生长在碲镉汞衬底上的碲镉汞薄膜表面形貌

Fig.2 Surface morphology of LPE growth of HgCdTe film on (111) CZT

针对上述现象，本文从碲镉汞晶体的滑移系统、薄膜应力释放等角度对其起源进行了分析，并分析了基于(211)B 面衬底的分子束外延碲镉汞表面交叉线特征。在此基础上对材料表面交叉线与器件性能的关系进行了讨论和分析。

2 碲镉汞晶体的滑移

2.1 碲镉汞晶体结构与薄膜应力释放

碲镉汞材料是一种具有闪锌矿结构（图 3）、禁带宽度连续可调的直接带隙三元化合物半导体。碲镉汞材料组分的变化引起的晶格常数的变化很微弱，适合于多层组分异质结构薄膜材料的生长^[1-3]。

碲镉汞薄膜制备方法主要包括液相外延、分子束外延（Molecular Beam Epitaxy）和金属有机物化学气相沉积（Metal Organic Chemical Vapor Deposition）技术。低位错密度高晶体质量的碲镉汞薄膜是制备高性能

能红外焦平面器件的基础，通常采用碲镉汞作为衬底，通过调节 Zn 组分值可实现碲镉汞衬底与碲镉汞外延层之间的晶格匹配。但在实际应用中，由于 Zn 组分分布不均匀等因素，很难做到衬底与外延层之间晶格完美匹配，碲镉汞衬底与碲镉汞外延层之间总是存在一定的失配度。图 4 为不同组分碲镉汞与碲镉汞衬底 Zn 组分之间的对应关系。

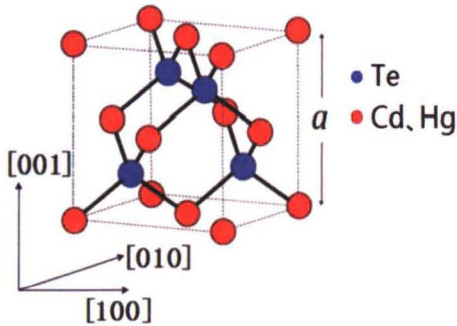


图 3 碲镉汞材料晶体结构

Fig.3 Crystal structure of HgCdTe

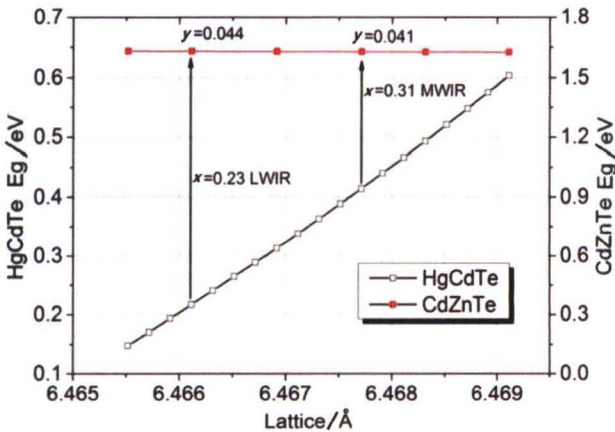


图 4 碲镉汞薄膜与碲镉汞衬底晶格匹配关系

Fig.4 Lattice match relationship between HgCdTe and CdZnTe

在存在晶格失配的衬底上进行薄膜外延时，由于薄膜受到应力的作用，随着外延层厚度的增加，薄膜中储存的应变能变大，达到临界厚度以后薄膜将发生应变弛豫，其中失配位错（Misfit Dislocation）的产生是最主要机制^[4-5]。碲镉汞外延薄膜中主要通过晶体的滑移形成失配位错来实现应力的释放。

2.2 (111)B 面碲镉汞晶体的滑移

碲镉汞闪锌矿结构具有 8 个等效滑移面，其中两两平行，因此只有 4 组滑移面真正相互独立。每一组滑移面中，有 3 条滑移方向平行于[110]方向，即完美位错的伯格斯矢量方向。4 组滑移面总共有 6 条独立的[110]线，每条线有正负两个方向，因而总共有 12 条可能的伯格斯矢量，构成了 $a/2[110]\{111\}$ 晶体滑移系统（图 5）^[5]。

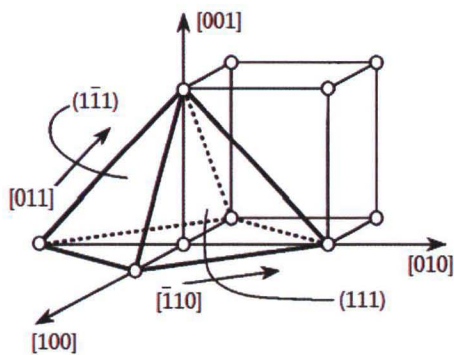


图 5 $a/2[110]\{111\}$ 滑移系统示意图

Fig.5 Schematic of $a/2[110]\{111\}$ slip system

通常在(111)B 面碲锌镉衬底上进行碲镉汞薄膜液相外延。这种情况下，碲镉汞晶体 8 个等效滑移面分别为(111)、 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 、 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 、 $(11\bar{1})$ 、 $(\bar{1}1\bar{1})$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})$ ；4 组真正相互独立的滑移面为(111)、 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 和 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面。

(111)B 衬底生长面(\vec{A})与不同滑移面(\vec{B})的交线方向可根据其晶面法向量计算得到，具体为：

$$\vec{A} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} \quad (1)$$
$$= (a_2b_3 - a_3b_2)\vec{i} - (a_1b_3 - a_3b_1)\vec{j} + (a_1b_2 - a_2b_1)\vec{k}$$

液相外延碲镉汞薄膜在 CZT(111)B 衬底上生长，图 6 所示为液相外延碲镉汞表面原子排布。

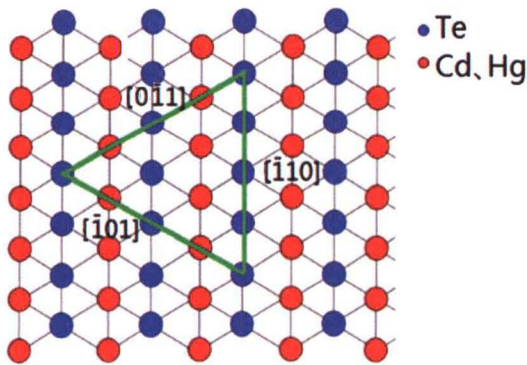


图 6 液相外延碲镉汞表面原子排布

Fig.6 Surface atoms arrangement of LPE growth of HgCdTe
在(111)B 面衬底上采用 LPE 技术生长碲镉汞时，计算滑移面与(111)面的交线时只需考虑 $(\bar{1}11)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 和 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面与(111)面的交线。计算结果如表 1 所示。

表 1 滑移面与(111)面交线晶向

Table 1 Cross line direction of plane (111) and slip planes			
(111) plane	Slip planes direction		Cross line direction
	1	$\bar{1}$ 1	$\bar{1}$ 0 1
1 1 1	1	1 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 1 0
	-1	1 1	0 $\bar{1}$ 1

图 7 为滑移面与(111)B 生长面交线示意图。可以看到 3 条交线构成一个夹角 60°正三角形；根据晶体的对称性，3 条交线均等价于 $[110]$ 方向。

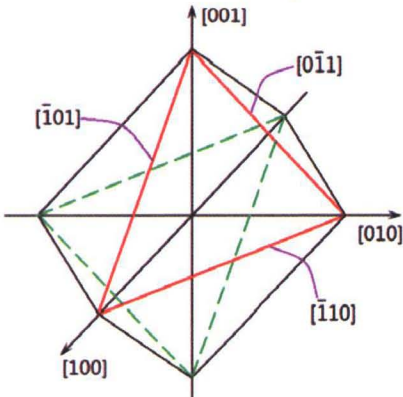


图 7 滑移面与(111)面交线示意图

Fig.7 Intersection schematic of slip planes and (111) plane

碲镉汞薄膜生长达到临界厚度时，外延层通过晶体滑移形成失配位错释放应力。失配位错形成以后，应变调制生长表面从而形成薄膜表面交叉线形貌。薄膜表面交叉线越明显的材料其 X 射线衍射貌相交交叉线也越明显，图 8 所示为不同晶格失配度（室温）下碲镉汞样品的 X 射线衍射貌相结果^[6]。

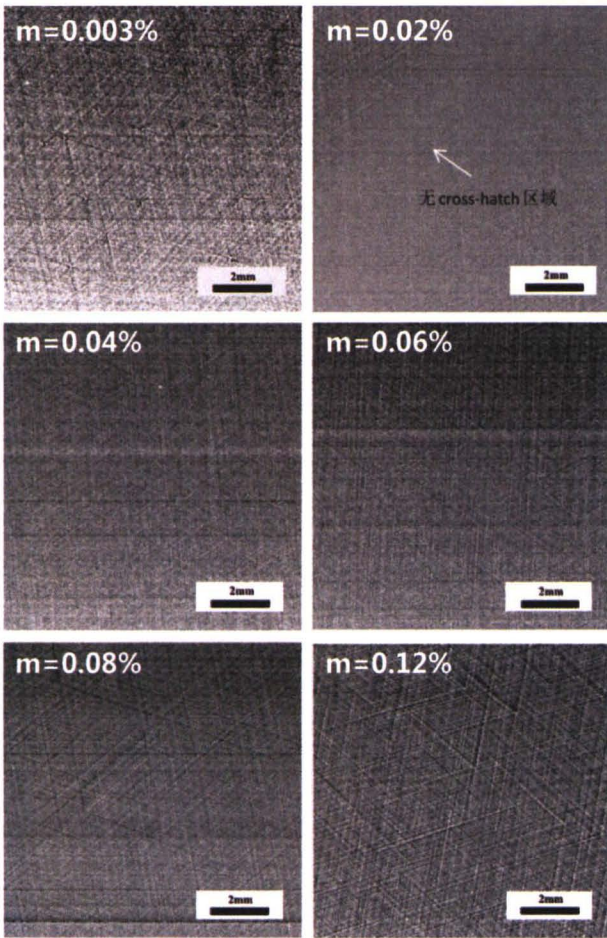


图 8 不同晶格失配度时碲镉汞的 X 射线衍射貌相

Fig.8 X-ray morphology of HgCdTe with different mismatch

晶格失配度 0.02% 时 X 射线貌相中央区域没有出现交叉线形貌, 而样品周围区域失配度变大, 出现了交叉线衍射形貌。不同失配度下 X 射线衍射形貌差异明显; 在晶格失配度大于 0.08% 时交叉线形貌特征变得十分明显^[6]。不出现 Crosshatch 衍射貌相所对应的区域并不是零失配而是失配约 0.02%, 这是因为碲镉汞与碲锌镉衬底之间热膨胀系数不同使得不同温度下晶格失配度不同, 失配位错的产生取决于生长温度下外延层与衬底之间的晶格失配, 而不是室温下的测试结果^[6-7]。

对碲镉汞薄膜进行剥层腐蚀测试, 交叉线结构从碲镉汞表面延伸到接近衬底界面以上约 2 μm 处^[7]。采用侧壁腐蚀坑测试揭示材料的失配位错, 发现腐蚀坑在界面以上约 1.6 μm 处呈线性排列 (图 9)^[8]。

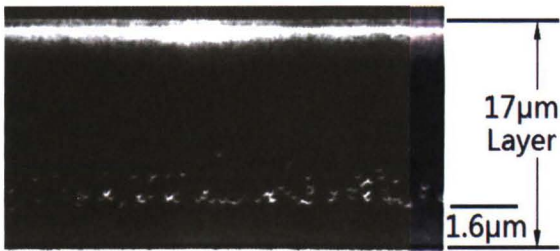


图 9 LPE 碲镉汞侧壁腐蚀坑分布

Fig.9 Etch pit density (EPD) distribution of LPE HgCdTe profile

根据失配位错形成位置及 X 射线衍射交叉线貌相在外延层中分布的深度, 可以确定 X 射线衍射交叉线貌相出现在失配位错形成之后。失配位错的形成并不能完全释放外延层中的应变, 残余应变通过长程应变场演化为周期性的交叉线对称结构。

2.3 (211)B 面碲镉汞晶体的滑移

基于前述碲镉汞晶体滑移系统的分析方法, 可拓展到(211)B 衬底上采用分子束外延技术生长的碲镉汞薄膜晶体滑移的分析。在(211)B 面衬底上采用 MBE 技术生长碲镉汞时, 计算滑移面与(211)面的交线时只需考虑(111)、 $(\bar{1}11)$ 、 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})$ 面与(211)面的交线。

计算结果如表 2。

表 2 滑移面与(211)面交线晶向

Table 2 Cross line direction of plane (211) and slip planes

(211) plane	Slip planes direction	Cross line direction
2 1 1	1 1 1	0 $\bar{1}$ 1
	$\bar{1}$ 1 1	0 $\bar{1}$ 1
	$\bar{1}$ $\bar{1}$ 1	$\bar{2}$ 3 1
	1 $\bar{1}$ 1	$\bar{2}$ 1 3

图 10 为滑移面与(211)B 生长面交线示意图。其

中(111)面和 $(\bar{1}11)$ 面与(211)面的交线均沿 $[01\bar{1}]$ 方向。

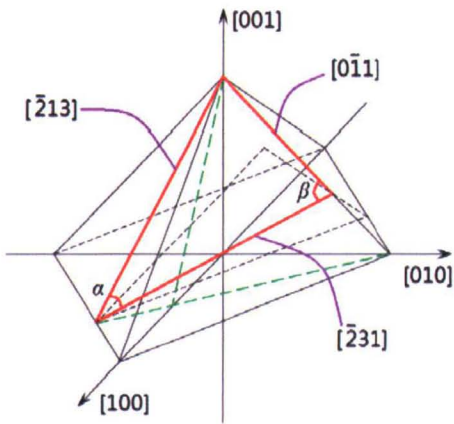


图 10 滑移面与(211)面交线示意图

Fig.10 Schematic of slip planes and (211) plane

定义 α 为 $[213]$ 和 $[231]$ 方向的夹角, β 为 $[01\bar{1}]$ 和 $[231]$ 方向的夹角, 根据空间几何可得^[9-11]:

$$\cos \alpha = \frac{[213] \cdot [231]}{|[213]| \cdot |[231]|} = \frac{5}{7} \Rightarrow \alpha \approx 44.4153^\circ \tag{2}$$

$$\cos \beta = \frac{[01\bar{1}] \cdot [231]}{|[01\bar{1}]| \cdot |[231]|} = \frac{\sqrt{7}}{7} \Rightarrow \beta \approx 67.7923^\circ \tag{3}$$

在 MBE 碲镉汞薄膜外延中, 失配位错的形成沿(111)、 $(\bar{1}11)$ 、 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})$ 滑移面与(211)B 生长面的交线。失配位错形成之后应变对生长表面的调制使得薄膜表面形成了平行于 $[213]$ 、 $[231]$ 和 $[01\bar{1}]$ 方向的表面交叉线形貌相^[9-11]。

图 11 为昆明物理研究所在(211)B 面碲锌镉衬底上采用 MBE 技术生长的碲镉汞薄膜表面显微形貌, 表面存在明显的交叉线图案。

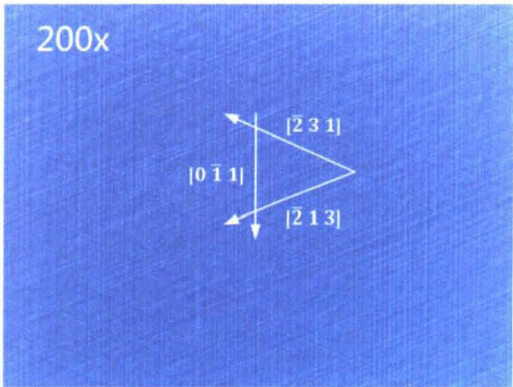


图 11 MBE 生长 HgCdTe/CdZnTe 表面形貌

Fig.11 Surface morphology of HgCdTe on (211) CZT substrate by MBE

3 “交叉线”特征与器件性能

在实际碲镉汞薄膜外延生长过程中，外延层与衬底之间的失配并不能完全消除。在薄膜材料外延生长过程控制良好的情况下，失配位错形成后应变对生长表面的调制作用使得材料表面形成均匀的表面交叉线形貌相，碲镉汞薄膜表面交叉线起伏高度约 4 nm 左右。碲镉汞外延薄膜表面出现交叉线形貌相是一种正常的状态；交叉线的出现可以一定程度上反映薄膜生长工艺的成熟度^[12]。失配位错的形成能够释放由于晶格失配等带来的大部分应变，但是外延薄膜中还是会存在一定程度的残余应变。残余应变使得晶格发生弹性形变，X 射线衍射貌相交叉线来源于外延层中失配位错形成后的残余应变，残余应变的存在对器件性能存在一定的影响^[13]。

热响应均匀性和暗电流是碲镉汞红外焦平面器件的关键参数。响应均匀性好的器件能够简化焦平面器件非均匀校正过程，从而在环境条件变化时具有低的残留固定模式噪声（Residual fixed pattern noise, RFPN）漂移，获得高质量的图像。如果焦平面器件热响应图出现“交叉线”，表明器件相邻的像元之间性能存在差异^[13]。图 12 为甚长波红外焦平面（ $\lambda_c=15\text{ }\mu\text{m}$, $30\text{ }\mu\text{m}$ 中心距）热响应测试结果，热响应的 Mapping 结果呈现出规则的交叉状图形^[13]。

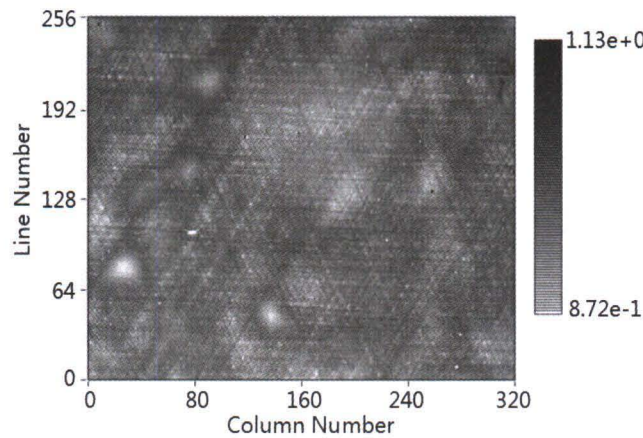


图 12 甚长波焦平面像元响应信号 Mapping 结果
Fig.12 Responsivity Mapping test result of VLWIR FPAs

图 13 为甚长波红外焦平面阵列（ $30\text{ }\mu\text{m}$ 中心距）的暗电流 Mapping 测试结果，电流值分布呈现出较低的离散性，暗电流的面分布图都呈现出交叉状图案^[14]。

一般焦平面阵列热响应和暗电流 Mapping 测试呈现的 Crosshatch 图形对探测器性能没有明显的影响：经过不同的降温过程后图形依然稳定，经过两点校正后热响应图中的交叉线消失。

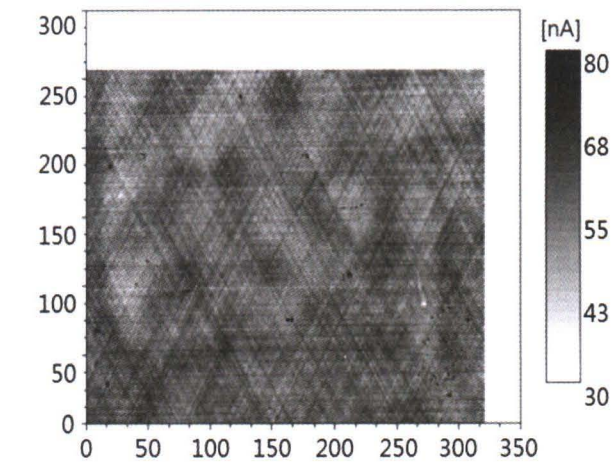


图 13 甚长波焦平面暗电流 Mapping 测试结果
Fig.13 Dark currents mapping test result of VLWIR FPAs

图 12 中响应信号 Mapping 图谱交叉线的平均线间距约 $100\text{ }\mu\text{m}$ ，而碲镉汞材料的 X 射线衍射形貌图谱中交叉线的平均线间距分布一般在 $50\sim 200\text{ }\mu\text{m}$ 范围，二者在数值上可比拟。X 射线衍射形貌揭示了材料中的残余应变，因此，焦平面的响应图中交叉线的出现为残余应变对器件响应分布的调制所致。

在光伏器件焦平面阵列中，碲镉汞材料中的残余应变会降低材料的载流子寿命，从而增大器件暗电流、降低器件响应率。在响应率 Mapping 和暗电流 Mapping 表现出 Crosshatch 特征。此类特征只有在其他影响焦平面像元响应率（暗电流）离散的因素足够低的情况下，残余应变对光响应的调制作用才能显示出来，从而在器件响应（暗电流）Mapping 图上出现交叉线图案^[14]。

对于 Si、Ge 或 GaAs 等晶格失配度较大的异质衬底上生长的碲镉汞薄膜，由于外延层中穿越位错密度过高（ $>5\times 10^6\text{ cm}^{-2}$ ），导致器件的少子寿命相对较低，暗电流较大，残余应变对器件性能的调制作用为次要因素，因此采用分子束外延生长在大失配衬底上的碲镉汞薄膜研制的焦平面器件不容易观察到热响应图的“交叉线”特征。

对于碲锌镉衬底，通过选择合适的组分来调节碲镉汞外延层与衬底之间的晶格失配度在一定范围内以提高衬底的利用率，优化生长工艺从而生长出表面交叉线形貌良好、具有 X 射线交叉线衍射貌相的样品，有利于制备出高性能的红外焦平面器件。

综上所述，在碲镉汞红外焦平面器件热响应（暗电流）Mapping 测试图出现交叉线，可以从一个方面反映出材料和器件制备工艺已经达到较高的成熟度。

4 小结

本文从碲镉汞晶体滑移系统的角度探讨了碲镉

汞薄膜表面交叉线、X射线衍射貌相交叉线的产生和几何结构,分析了与器件响应图(暗电流 Mapping)及器件性能的关系。衬底与外延层之间的晶格失配是形成碲镉汞表面交叉线的原因,X射线衍射貌相中交叉线的出现是由于晶格失配导致失配位错形成后的残余应变引起。在实际的碲镉汞薄膜材料生长中,表面交叉线的出现可以从侧面来反映材料生长工艺水平的成熟度。碲镉汞焦平面器件热响应 Mapping 测试图出现交叉线状的几何结构表明残余应变对器件性能产生的影响为主要影响因素,其他的一些造成器件性能下降的因素如高密度位错、表面漏电流等因素被有效抑制。碲镉汞焦平面热响应图交叉线越明显,器件具有更好的性能,同时表明制备过程中材料和器件工艺具有更高的成熟度。

参考文献:

[1] 褚君浩. 窄禁带半导体物理学[M]. 北京: 科学出版社, 2005.
CHU Junhao. *Narrow-gap Semiconductor Physics*[M]. Beijing: Science Press, 2005.

[2] 杨健荣. 碲镉汞材料物理与技术[M]. 北京: 国防工业出版社, 2012.
YANG Jianrong. *Physics and Technology of HgCdTe Materials*[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2012.

[3] Tobin S P, Smith F T J, Norton P W, et al. The relationship between lattice matching and crosshatch in liquid phase epitaxy HgCdTe on CdZnTe substrates[J]. *Journal of Electronic Materials*, 1995, **24**(9): 1189-1199.

[4] Matthews J W, Blakeslee A E. Defects in epitaxial multi-layers[J]. *Journal of Crystal Growth*, 1974, **27**: 118-125.

[5] Speck J S, Brewer M A, Beltz G. Scaling laws of the reduction of threading dislocation densities in homogeneous buffer layers[J]. *Journal of Applied Physics*, 1996, **80**(7): 3808-3816.

[6] 孙权志. 大面积高性能 Au 掺杂 HgCdTe 液相外延的制备及性能研究

[D]. 上海: 中科院上海技术物理研究所, 2012.
SUN Quanzhi, Study on Preparation Technology and Properties of Au Doped HgCdTe LPE Materials with Large Size and High Quality[D]. Shanghai: Shanghai Institute of Technological Physics, 2012.

[7] Rhiger D R, Sen S, Peterson J M. Lattice mismatch induced morphological features and strain in HgCdTe epilayers on CdZnTe substrates[J]. *Journal of Electronic Materials*, 1997, **26**(6): 515-523.

[8] Price S L, Hettich H L, Sen S, et al. Investigation of the crosshatch pattern and localized defects in epitaxial HgCdTe[J]. *Journal of Electronic Materials*, 1998, **27**(6): 564-572.

[9] Martinka M, Almeida L A, Benson J D, et al. Characterization of crosshatch morphology of MBE (211) HgCdTe[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2001, **30**(6): 632-636.

[10] Martinka M, Almeida L A, Benson J D, et al. Suppression of strain-induced crosshatch on molecular beam epitaxy (211)B HgCdTe[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2001, **30**(6): 732-736.

[11] CHANG Yong, Becker C R, Grein C H, et al. Surface morphology and defect formation mechanisms for HgCdTe (211)B grown by molecular beam epitaxy[J]. *Journal of Electronic Materials*, 2008, **37**(9): 1171-1183.

[12] 焦翠灵, 赵守仁, 陈新强, 等. HgCdTe/CdZnTe 晶格失配与 X 光衍射貌相的关系研究[J]. *激光与红外*, 2007, **37**: 910-914.
JIAO Cuiling, ZHAO Shouren, CHEN Xinqiang, et al. Relationship between lattice mismatching and X-ray topography of HgCdTe/CdZnTe[J]. *Laser & Infrared*, 2007, **37**: 910-914.

[13] Terrier B, Delannoy A, Chorier P, et al. LWIR and VLWIR detectors development at SOFRADIR for space applications[C]//*Proc. of SPIE*, 2010, **7826**(1J): 1-12.

[14] Gravrand O, Chorier P H. Status of very long infrared-wave focal plane array development at DEFIR [C]//*Proc. of SPIE*, 2009, **7298**(2): 1-12.