

УДК 621.315.592

В. С. Варавин, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, Ю. Г. Сидоров

*(Новосибирск)***ДОНОРНЫЕ ДЕФЕКТЫ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЯХ CdHgTe,
ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ***

Проведено изучение электрофизических свойств гетероэпитаксиальных структур (ГЭС) кадмий–ртуть–теллур (КРТ), выращенных методами молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и парофазной эпитаксии (ПФЭ) на подложках арсенида галлия и теллурида кадмия. Найдено, что концентрация электронов в ГЭС КРТ МЛЭ уменьшается с увеличением температуры выращивания и состава слоя X_{CdTe} и лежит в интервале $8 \cdot 10^{13} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Для слоев ГЭС КРТ, выращенных методом ПФЭ на нелегированных подложках, концентрация электронов достигает значения $(5 - 10) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а при использовании подложек, легированных галлием, $-(1 - 3) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Определены энтальпии примесей Al, Ga, In, Si, Ge, Sn, Cu в теллуриде кадмия и теллуриде ртути. Рассчитаны равновесные концентрации электрически активного галлия и антиструктурного теллура для КРТ различного состава X_{CdTe} (0,2–0,9) и для различных температур (100–600 °С). Проведен расчет зависимости концентрации антиструктурного теллура в КРТ от температуры и состава с учетом неравновесности процесса роста. Найдено качественное соответствие экспериментальных результатов для ГЭС КРТ МЛЭ с полученными расчетными зависимостями концентрации антиструктурного теллура с учетом кинетики встраивания.

Введение. Тепловизионные системы наблюдения на основе большеформатных матриц инфракрасных (ИК) фотоприемников (ФП), работающие в диапазонах длин волн 3–5 и 8–14 мкм, широко применяются как в военной технике, так и для гражданских целей. Основным материалом для изготовления ИК ФП служит твердый раствор кадмий–ртуть–теллур (КРТ) чаще всего в виде гетероэпитаксиальных структур (ГЭС). Наиболее гибким методом выращивания ГЭС большой площади является интенсивно развиваемый метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ).

Фотоэлектрические параметры ИК ФП определяются концентрацией и подвижностью основных носителей заряда, а также временем жизни неравновесных носителей. Для ИК ФП на основе $p-n$ -переходов необходим материал с оптимальными концентрациями доноров и акцепторов. Фоторезисторные и SPRITE ИК ФП требуют материал n -типа с низкой концентрацией

* Работа выполнена при поддержке программы «Физика твердотельных наноструктур» (грант № 2000-3Т).

и высокой подвижностью основных носителей заряда и большим временем жизни неравновесных носителей заряда.

Характерной особенностью КРТ является электрическая активность и высокая подвижность собственных точечных дефектов, концентрация которых может меняться в широких пределах и влиять на электрические параметры материала. Помимо собственных точечных дефектов необходимо учитывать возможность непреднамеренного введения электрически активных атомов примеси.

В нелегированных ГЭС КРТ, выращенных методом МЛЭ на различных подложках (таких, как CdZnTe, GaAs, Si, Ge, сапфир), наблюдается сложная картина зависимости электрических свойств от условий выращивания. К последним относятся материал и ориентация подложки, ее температура, давление ртути и состав слоя X_{CdTe} .

Общепризнанным считается, что дырочная проводимость в нелегированном КРТ (в том числе ГЭС КРТ МЛЭ) обусловлена вакансиями в подрешетке металла, которые являются дважды ионизированными акцепторными центрами. Однако наблюдаемая электронная проводимость в ГЭС КРТ, выращенных методом МЛЭ на различных подложках без дополнительного легирования (причем концентрации носителей заряда лежат в пределах одного порядка – от 10^{14} до 10^{15} см⁻³), приписывается различным дефектам. Так, Фурье и Сиванантан [1] объяснили *n*-тип проводимости в ГЭС КРТ МЛЭ на подложках CdZnTe присутствием донорных примесей Li и Na в междоузлиях, которые диффундируют из подложки, хотя выращивание происходит в условиях избытка теллура и, следовательно, должен расти материал *p*-типа проводимости. Концентрации электронов в ГЭС КРТ МЛЭ на подложках GaAs [2] и Si [3] составляют $10^{14} - 2 \cdot 10^{15}$ см⁻³, но авторы не объясняют, какими дефектами обусловлен *n*-тип проводимости. В работе [4] рост КРТ методом МЛЭ на подложках GaAs(100) дал материал *n*-типа составов $X_{\text{CdTe}} < 0,35$, что авторы связывают с антиструктурным Te (теллур в узле металлической подрешетки) как донором.

Точечными дефектами донорного типа в КРТ могут быть антиструктурный теллур [5], междоузельные атомы металла (Hg, Cd) [6], вакансии в подрешетке теллура [6] и атомы примеси в узлах и междоузлиях решетки.

Междоузельные атомы металлов подвижны, легко диффундируют (энергия активации их диффузии не превышает 0,12 эВ [7]), при охлаждении после выращивания их концентрация в объеме должна значительно снижаться. Вакансии в подрешетке теллура можно не учитывать, так как выращивание пленок КРТ методом МЛЭ, как указывалось ранее, проводится в условиях избытка теллура.

Таким образом, наиболее вероятными точечными дефектами донорного типа в ГЭС КРТ МЛЭ могут быть неконтролируемые примеси или антиструктурный теллур. Относительно присутствия антиструктурных атомов теллура в КРТ нет устоявшихся представлений. В работе [6] утверждается, что энтальпии образования антиструктурных дефектов чрезвычайно высоки в «таких ионных соединениях, как CdTe и $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, и поэтому следует рассматривать только катионные и анионные вакансии и междоузельные атомы». Однако расчеты энергии образования различных дефектов в ZnTe, CdTe и HgTe [5] (ожидаемая неопределенность в энергиях $\pm 0,2$ эВ) показывают, что антиструктурный теллур имеет большие концентрации в ZnTe, CdTe и HgTe, чем предполагалось ранее. Считается, что антиструктурный теллур

может быть ответственным за донороподобные глубокие состояния при $0,4E_g$ и $0,7E_g$ в КРТ [8].

Следует заметить, что донорами могут быть и более сложные дефекты (микродвойники, скопления точечных дефектов, дислокации и др.).

Цель данной работы – выявить вероятные точечные дефекты, ответственные за электронную проводимость в ГЭС КРТ, выращенных методом МЛЭ без дополнительного легирования.

1. **Эксперимент.** ГЭС КРТ составов $X_{CdTe} \sim 0,2-0,35$ выращивались методом МЛЭ [9] без дополнительного легирования на подложках GaAs(130) с буферным слоем CdZnTe. Температуры выращивания $180-195$ °С. Давление паров ртути при выращивании было оптимальным и существенно не изменялось. Скорость роста слоев КРТ составляла $2-3$ мкм/ч.

Концентрацию и подвижность носителей заряда измеряли с помощью эффекта Холла при температуре 77 К и индукции магнитного поля $0,05-1$ Тл. ГЭС КРТ, выращенные методом МЛЭ, имеют *n*-тип проводимости.

Концентрация и подвижность электронов в ГЭС КРТ МЛЭ для составов $X_{CdTe} \sim 0,2-0,22$ находятся в диапазонах $10^{14}-10^{15}$ см⁻³ и $(1-1,5) \times 10^5$ см²/(В·с) соответственно, а для составов $X_{CdTe} \sim 0,3-0,35$ – в диапазонах $8 \cdot 10^{13}-5 \cdot 10^{14}$ см⁻³ и $(3-4) \cdot 10^4$ см²/(В·с) соответственно. Было установлено, что для составов $X_{CdTe} \sim 0,2-0,22$ концентрация носителей заряда уменьшается с увеличением температуры выращивания. Несмотря на разброс экспериментальных результатов, значения концентрации носителей заряда при температуре выращивания 180 °С составляют $5 \cdot 10^{14}-10^{15}$ см⁻³ и уменьшаются до $(1-2) \cdot 10^{14}$ см⁻³ при 190 °С. При температурах более 190 °С наблюдается смешанная проводимость. Это, по-видимому, связано с заметным увеличением концентрации вакансий ртути при увеличении температуры выращивания, что приводит к заметному вкладу дырочной проводимости. Действительно, в [10] было показано, что с ростом температуры наблюдается рост пленок КРТ МЛЭ *p*-типа проводимости. С увеличением состава X_{CdTe} ГЭС КРТ МЛЭ уменьшается концентрация носителей при одинаковых условиях выращивания. Изотермический отжиг ГЭС КРТ МЛЭ в среде гелия или водорода при температурах $200-300$ °С приводит к конверсии ГЭС КРТ МЛЭ *n*-типа проводимости в *p*-тип, концентрация носителей заряда которого соответствует равновесной концентрации вакансий ртути для данной температуры. Это свидетельствует о том, что концентрация донорных центров, ответственных за измеряемые электрофизические параметры, практически совпадает с концентрацией электронов.

Изучены электрофизические параметры ГЭС КРТ, выращенных из паровой фазы при значительно более высоких температурах, чем в методе МЛЭ. ГЭС КРТ составов $X_{CdTe} \sim 0,2-0,22$ выращивались методом паровой фазной эпитаксии (ПФЭ) [11] на нелегированных и легированных подложках CdTe. Температуры выращивания $500-550$ °С. Концентрация электронов в ГЭС КРТ, выращенных методом ПФЭ на нелегированных подложках, была порядка $(5-10) \cdot 10^{15}$ см⁻³ для составов $X_{CdTe} \sim 0,2-0,22$; использование подложек CdTe, легированных галлием, увеличивает концентрацию электронов до $(1-3) \cdot 10^{17}$ см⁻³. Это может свидетельствовать о заметном влиянии примесей, находящихся в подложках, на электрофизические свойства ГЭС КРТ ПФЭ.

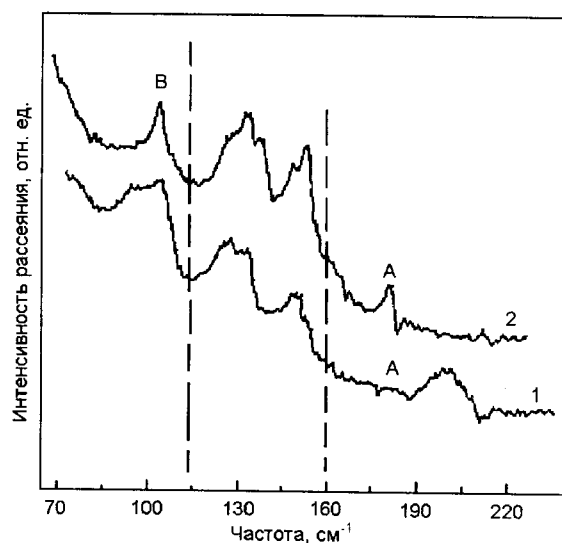


Рис. 1. Спектры рамановского рассеяния пленок КРТ, выращенных методом МЛЭ: 1 – после роста, 2 – после изотермического отжига

Присутствие точечных дефектов в КРТ проявляется в спектрах комбинационного рассеяния света [12]. Были изучены спектры комбинационного рассеяния света ГЭС КРТ МЛЭ после роста и изотермического отжига (рис. 1). Наблюдалось два дополнительных пика в низкочастотной и высокочастотной областях спектра, которые соответствуют колебаниям разных локальных дефектов. Низкочастотный пик спектра при частоте 90 см^{-1} обусловлен существованием свободных связей и дефектами вакансионного типа (В). Высокочастотные пики (А) спектра при частотах $200, 180 \text{ см}^{-1}$, возможно, связаны с дефектами, атомные конфигурации которых приводят к сильному напряжению окружающих связей. В результате частоты локальных колебаний становятся выше, чем в ненапряженном объеме. Таким дефектом может быть теллур на месте кадмия, т. е. антиструктурный теллур со связями Те–Те.

2. Расчет равновесных концентраций донорных дефектов в КРТ. Дефектами, определяющими электронный тип проводимости в нелегированных ГЭС КРТ, выращенных методами МЛЭ и ПФЭ, могут быть донорные примеси, такие как In, Ga, Al, Si и др., поступающие, например, из системы выращивания, и, как показывают спектры комбинационного рассеяния, антиструктурный теллур.

Для определения наиболее вероятного источника неконтролируемого легирования при росте ГЭС КРТ МЛЭ и механизма внедрения в растущий слой проведем расчет и анализ равновесных концентраций.

2.1. Расчет равновесной концентрации примесей. Равновесные концентрации примесей для КРТ МЛЭ рассчитывали на основе метода, разработанного в [13]. Рассматривалась реакция растворения примеси, при которой атом примеси замещает основной атом в подрешетке двухкомпонентного полупроводника. Проводился расчет теплового баланса реакции (изменения энтальпии) с учетом изменения энергии связей при замещении атомов и возникающих механических напряжений из-за разницы тетраэдрических ради-

угов атомов, а также с учетом изменения энтропии при замещении атома основного вещества атомом примеси. Использовались следующие приближения. Полагалось, что колебательный спектр основного вещества существенно не меняется при образовании твердого раствора [14, 15]. В этом случае изменение энтропии при растворении примеси в кристалле двухатомного полупроводника определялось как разность между энтропией газообразного замещаемого компонента основного вещества и энтропией одноатомной газообразной примеси. Энтропии паров элементов в одноатомном состоянии известны [16, 17]. Энергия связей атома примеси с атомами основного вещества определялась как полусумма энергий связей атомов в кристаллах, состоящих из атомов примеси и атомов основного вещества.

Примесь	$\Delta H_{\text{п}}$, ккал/моль	
	HgTe	CdTe
Al	-46,12	-18,89
Ga	-35,20	-7,97
In	-34,00	-6,77
Si	-54,39	-27,16
Ge	-47,20	-19,97
Sn	-47,32	-20,09
Cu	-55,79	-28,56

Энергии механических напряжений рассчитывали исходя из упругих постоянных основного вещества [18] и разницы тетраэдрических радиусов атома примеси и замещаемого им атома основного вещества [19].

В таблице показаны результаты расчета энтальпии $\Delta H_{\text{п}}$ легирования HgTe и CdTe примесями, замещающими атомы в подрешетке металла. Термодинамические данные для теллурида ртути и теллурида кадмия взяты из работ [20, 21].

Полученные оценочные значения $\Delta H_{\text{п}}$ позволяют рассчитывать равновесные концентрации примесей для различных технологических процессов.

Равновесная концентрация электрически активной примеси N_i , растворенной в полупроводнике, связана с давлением паров примеси следующим образом:

$$[N_i] = (N_c / 2n_i) K P_i / P_{\text{Me}}, \quad (1)$$

где N_c – плотность состояний в зоне проводимости; n_i – собственная концентрация носителей заряда; K – константа равновесия реакции замещения атома металла атомом примеси в решетке КРТ; P_i – равновесное парциальное давление примеси в газовой фазе; P_{Me} – равновесное парциальное давление замещаемого металла в газовой фазе. Константа K связана обычным образом с химическими потенциалами примеси и других компонентов реакции растворения примеси:

$$K = \exp(-(\Delta H - T\Delta S)/RT), \quad (2)$$

где ΔH – изменение энтальпии, ΔS – изменение энтропии, R – газовая постоянная, T – температура. Суммируя количество примеси, замещающей ртуть и кадмий, и учитывая низкую энергию ионизации, можно найти равновесную концентрацию примеси для заданных условий и состава КРТ.

При выращивании КРТ на подложках GaAs методом МЛЭ одной из вероятных электрически активных примесей является галлий, попадающий в пленку из подложки. Результаты расчета равновесной концентрации электрически активного галлия в слоях КРТ разного состава представлены на рис. 2. Расчет проводился для условий, соответствующих активности теллура, равной единице. Рассчитана максимальная концентрация галлия, которая

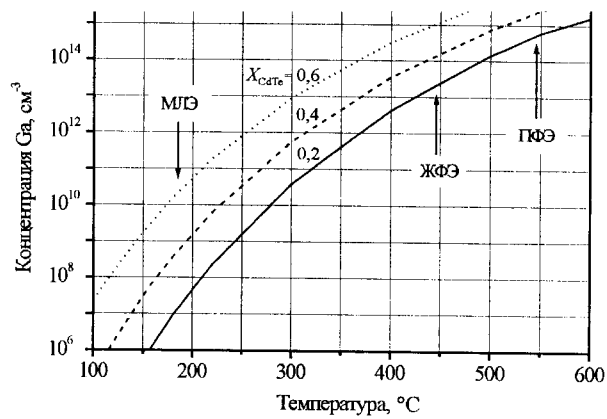


Рис. 2. Температурная зависимость концентрации электрически активного галлия в КРТ разного состава X_{CdTe} , рассчитанная в равновесном приближении для активности теллура, равной единице (стрелками указаны характерные температуры выращивания в различных методах и соответствующие им концентрации)

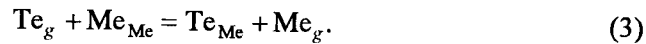
могла бы реализоваться в присутствии фазы Ga_2Te_3 . Именно в виде этой фазы присутствуют значительные количества галлия при активности теллура, равной единице.

Как следует из рис. 2, концентрация галлия в ГЭС КРТ при температурах выращивания методом МЛЭ низка ($10^8 - 10^{10} \text{ см}^{-3}$) и не может обуславливать наблюдаемые концентрации фоновых доноров. Кроме того, в ГЭС КРТ, выращенных методом МЛЭ на подложках Si(112), когда наличие ощутимых количеств галлия исключено, концентрация доноров также находится на уровне $8 \cdot 10^{14} - 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, как и в ГЭС КРТ МЛЭ на подложках GaAs.

При повышении температуры до значений, используемых в методах жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) и ПФЭ, растворимость галлия увеличивается до $10^{15} - 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (температура $550 \text{ }^\circ\text{C}$, состав $X_{\text{CdTe}} = 0,2 - 0,6$) и его присутствие в системе выращивания должно приводить к повышению уровня фоновое легирования. Из рис. 2 следует также, что некоторое увеличение уровня равновесного легирования галлием должно происходить при увеличении содержания теллурида кадмия в твердом растворе. Отличие рассчитанной равновесной концентрации галлия в КРТ состава $X_{\text{CdTe}} \sim 0,2$ от экспериментально наблюдаемой концентрации носителей заряда $(1-3) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в ГЭС КРТ, выращенных методом ПФЭ на подложках CdTe, легированного галлием, может быть связано с допущенными при расчете приближениями по оценке энергетических процессов растворения примеси или с влиянием кинетики (пересыщения при росте) на процесс внедрения в растущий слой (см. п. 3). Тем не менее возможные уточнения энергетических характеристик процессов растворения примеси не приведут к существенным изменениям в оценке равновесной концентрации при температурах роста методом МЛЭ, которые могли бы объяснить экспериментально наблюдаемую концентрацию электронов в ГЭС КРТ МЛЭ.

2.2. Расчет равновесной концентрации антиструктурного теллура. Расчет равновесной концентрации антиструктурного теллура проводился по методу, описанному в п. 2.1.

Реакцию образования антиструктурного теллура можно записать в виде



Концентрацию антиструктурного теллура можно определить через константу равновесия этой реакции:

$$[\text{Te}_{\text{Me}}] = K_3 x_{\text{Me}} P_{\text{Te}} / P_{\text{Me}}, \quad (4)$$

где K_3 – константа равновесия реакции (3), x_{Me} – мольная доля металла, P_{Te} и P_{Me} – давления паров теллура и замещаемого металла соответственно. Для расчета K_3 были определены энтальпии антиструктурного теллура $\Delta H_{\text{Te}(\text{Cd})} = 58,05$ и $\Delta H_{\text{Te}(\text{Hg})} = 20,50$ ккал/моль в CdTe и HgTe соответственно на основе энергий, рассчитанных в работе [5]. Изменением энтропии при переходе теллура из узла в подрешетке теллура в узел в подрешетке металла можно пренебречь. Суммирование количества теллура, замещающего ртуть и кадмий, и учет ионизации позволяют найти общую концентрацию антиструктурного теллура для заданных условий и состава КРТ.

На рис. 3 приведены результаты расчета равновесной концентрации теллура в узлах подрешетки металла для условий, когда активность теллура (a_{Te}) в среде, в равновесии с которой находится КРТ, равна единице. Из расчета следует, что при одинаковой активности теллура при более высоких температурах концентрация антиструктурного теллура должна быть выше. Так, при ЖФЭ из растворов–расплавов на основе теллура ($a_{\text{Te}} \sim 1$) при 450 °С концентрация антиструктурного теллура должна быть на 6–7 порядков выше, чем при МЛЭ (180 °С). С другой стороны, известно, что в ЖФЭ при принятии достаточных мер по очистке поверхности подложки и при использовании чистых материалов можно снизить концентрацию фоновых доноров до уровня 10^{14} см^{-3} . Ясно, что для условий ЖФЭ концентрация антиструктурного теллура не может превышать это значение. Но тогда при температурах МЛЭ равновесная концентрация антиструктурного теллура не может превышать $10^7 - 10^8 \text{ см}^{-3}$. Поэтому антиструктурный теллур в концентраци-

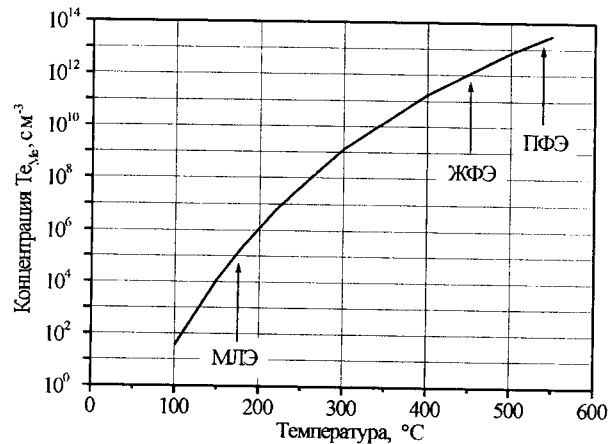


Рис. 3. Зависимость равновесной концентрации антиструктурного теллура от температуры для $X_{\text{CdTe}} = 0,2$; стрелками указаны характерные температуры выращивания в различных методах и соответствующие им концентрации

ях, соответствующих равновесным условиям, не может отвечать за наблюдаемый в ГЭС КРТ МЛЭ фоновый уровень доноров ($10^{14} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$).

3. Влияние кинетики на процессы встраивания антиструктурного теллура. Как следует из проведенных выше расчетов, равновесными концентрациями примесей и антиструктурного теллура нельзя объяснить наблюдаемую концентрацию электронов в ГЭС КРТ МЛЭ. Однако процесс роста при МЛЭ является существенно неравновесным и аналогичен росту из паровой фазы при больших пересыщениях. Рассмотрим внедрение в растущий слой дефектов с учетом неравновесности процесса. Обычно переход дефекта в объем приводит к повышению свободной энергии и равновесная концентрация дефектов в объеме ниже поверхностной концентрации. Дефекты, концентрация которых окажется равной равновесной концентрации, будут включаться в кристалл при нулевом пересыщении или при росте с ничтожно малым отклонением от равновесия, поскольку не будет движущей силы для включения дефектов сверх равновесной концентрации. В случае роста из паровой фазы пересыщение ΔG_{ss} в методе МЛЭ может достигать больших величин. Наличие пересыщения повышает вероятность формирования дефектных конфигураций кристалла пропорционально величине $\exp(\Delta G_d - \Delta G_{ss})/RT$, где ΔG_d – изменение свободной энергии внедрения дефекта в кристалл. Видно, что с увеличением пересыщения возрастает концентрация дефектов в растущем слое. При достаточно больших пересыщениях концентрации дефектов на поверхности и в поверхностном слое кристалла совпадут. В этом пределе, например, была разработана модель легирования кремния в методе МЛЭ [22]. Установлено, что при высоких температурах наблюдается экспоненциальная зависимость коэффициентов встраивания сурьмы и галлия при МЛЭ кремния и поведении примесей равновесное, а при низких температурах действуют кинетические ограничения [23] и коэффициенты встраивания этих примесей приближаются к единице.

Особенностью МЛЭ КРТ являются условия формирования дефектов, связанные с участием в процессе роста двухатомных молекул теллура. Термодинамический расчет показывает, что рост КРТ МЛЭ происходит при активности двухатомного теллура, равной единице. Кинетика поверхностных процессов изменит активность теллура, находящегося на поверхности в одно- и двухатомном состоянии следующим образом. Из-за активационного барьера для диссоциации молекул на атомы активность двухатомного теллура будет больше единицы, а одноатомного – меньше единицы. Поскольку активность молекул теллура может быть достаточно высокой и может приводить даже к образованию фазы теллура, часть молекул теллура может встраиваться целиком в решетку, заполняя собственный и металлический узлы. Низкие температуры выращивания в МЛЭ будут препятствовать восстановлению равновесной концентрации антиструктурного теллура за счет диффузии дефектов.

Существование большого пересыщения в методе МЛЭ облегчает захват дефектов, приводящих к избыточной энергии кристалла. Соответственно в выражении для концентрации дефектов появляется множитель $k_{kin} = \exp(-\Delta G_{ss}/RT)$, в котором пересыщение ΔG_{ss} определяется парциальными давлениями паров компонентов в эксперименте. Тогда $N_i = N_{i,eq} k_{kin}$.

Поскольку пересыщение при фиксированных давлениях паров с повышением температуры падает, множитель k_{kin} с повышением температуры понижается, а соответственно с повышением температуры выращивания

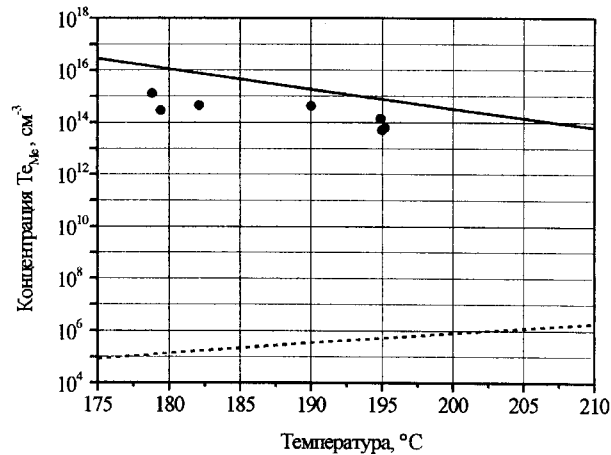


Рис. 4. Температурная зависимость концентрации антиструктурного теллура для КРТ состава $X_{CdTe} = 0,2$ для равновесных условий (штриховая линия), с учетом неравновесного захвата в условиях МЛЭ (сплошная линия), и экспериментально измеренная концентрация электронов проводимости в ГЭС КРТ МЛЭ (точки)

уменьшается концентрация растворенных точечных дефектов. Это позволяет из экспериментальных результатов определять, является ли процесс легирования равновесным (при этом с повышением температуры выращивания концентрации дефектов должны расти) или же он определяется отклонением процесса роста от равновесия (при этом концентрации электрически активных дефектов и соответственно концентрации измеряемых носителей заряда будут уменьшаться с повышением температуры выращивания).

Расчитанные значения равновесной концентрации антиструктурного теллура и концентрации с учетом кинетики захвата для характерных температур выращивания КРТ МЛЭ при скорости роста 3 мкм/ч и $X_{CdTe} = 0,2$ представлены на рис. 4. Из рисунка видно, что равновесная концентрация антиструктурного теллура очень мала и растет с повышением температуры, а концентрация антиструктурного теллура, рассчитанная с учетом кинетики,

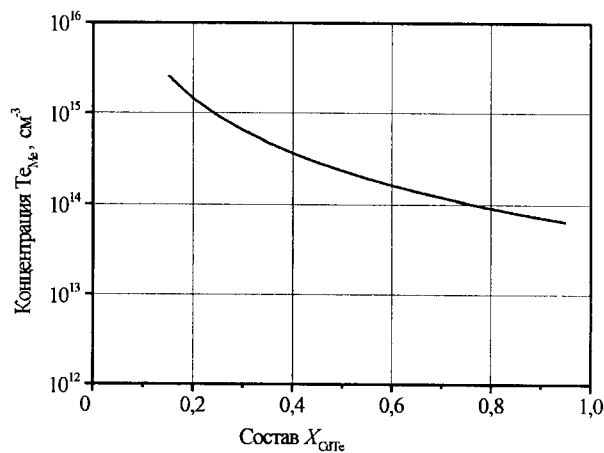


Рис. 5. Зависимость рассчитанной концентрации антиструктурного теллура с учетом кинетики встраивания от состава X_{CdTe} для температуры выращивания 170 °C

падает. Если учесть погрешность расчета, обусловленную невысокой точностью исходных термодинамических данных для антиструктурного теллура, которая в этом интервале температур составляет около двух порядков, то можно заключить, что концентрация антиструктурного теллура в кинетическом приближении может обуславливать наблюдаемые уровни неконтролируемых доноров ($N_i = 10^{14} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$).

Расчитанная зависимость концентрации антиструктурного теллура от состава выращиваемых слоев КРТ представлена на рис. 5. Расчет предсказывает некоторое снижение концентрации антиструктурного теллура с повышением содержания теллурида кадмия в твердом растворе. Экспериментальные значения концентрации электронов в пленках КРТ МЛЭ с повышением состава (от $X_{\text{CdTe}} \sim 0,2$ до $X_{\text{CdTe}} \sim 0,3$) также понижаются. Следовательно, антиструктурный теллур представляется в методе МЛЭ наиболее вероятным типом дефектов, определяющим концентрацию доноров в выращенных пленках КРТ.

Заключение. Проведены оценочные расчеты термодинамических характеристик донорных примесей в КРТ и равновесных концентраций электрически активного галлия и антиструктурного теллура. Показано увеличение концентраций равновесных примесей и антиструктурного теллура с повышением температуры. Концентрации равновесных донорных примесей и антиструктурного теллура не могут объяснить наблюдаемые электрофизические параметры (концентрацию носителей заряда) ГЭС КРТ МЛЭ.

Предложена модель неравновесного встраивания антиструктурного теллура в КРТ. Расчеты для условий МЛЭ КРТ с учетом отклонения от равновесия предсказывают повышение концентрации антиструктурного теллура до значений $10^{14} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$. С повышением температуры выращивания и содержания CdTe в твердом растворе расчет предсказывает снижение концентрации антиструктурного теллура. Экспериментально полученные зависимости концентрации электронов в ГЭС КРТ МЛЭ от температуры выращивания и состава X_{CdTe} могут быть объяснены встраиванием антиструктурного теллура, являющегося дефектом донорного типа.

Авторы выражают благодарность А. Б. Талочкину за измерения спектров комбинационного рассеяния, М. В. Якушеву, Л. Д. Бурдиной, О. И. Малышеву за помощь в проведении работ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Wiyewarnasuriya P. S., Faurie J. P., Sivananthan S.** Doping of (211)B mercury cadmium telluride // *Journ. Cryst. Growth*. 1996. **159**. P. 1137.
2. **Varavin V. S., Dvoretzky S. A., Liberman V. I. et al.** Molecular beam epitaxy of high quality HgCdTe films with control of the composition distribution // *Ibid.* P. 1161.
3. **Wiyewarnasuriya P. S., Zandian M., Edwall D. D. et al.** MBE *P-on-n* $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ heterostructure detectors on silicon substrates // *Journ. Electron. Mater.* 1998. **27**. P. 546.
4. **Boukerche M., Wiyewarnasuriya P. S., Sivananthan S. et al.** The doping of mercury cadmium telluride growth by molecular beam epitaxy // *Journ. Vac. Sci. Technol. A*. 1988. **6**. P. 2830.
5. **Berding M. A., Van Schilfgaarde M., Paxton A. T., Sher A.** Defects in ZnTe, CdTe, and HgTe: Total energy calculations // *Journ. Vac. Sci. Technol. A*. 1990. **8**, N 2. P. 1103.
6. **Morgan-Pond C. G., Raghavan R.** Structural quality of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$: Equilibrium point defects // *Phys. Rev. B*. 1985. **31**. P. 6616.

7. **Belas E., Grill R., Franc J. et al.** Determination of the migration energy of Hg interstitials in (HgCd)Te from ion milling experiments // *Journ. Cryst. Growth*. 1996. **159**. P. 1117.
8. **Jones C. E., James K., Merz J. et al.** Status of point defects in HgCdTe // *Journ. Vac. Sci. Technol. A*. 1985. **3**. P. 131.
9. **Сидоров Ю. Г., Дворецкий С. А., Михайлов Н. Н. и др.** Молекулярно-лучевая эпитаксия узкозонных соединений $Cd_xHg_{1-x}Te$. Оборудование и технология // *Опт. журн.* 2000. **67**, № 1. С. 39.
10. **Arias J. M., Shin S. H., Pasko J. G. et al.** Long and middle wavelength infrared photodiodes fabricated with $Cd_xHg_{1-x}Te$ growth by molecular beam epitaxy // *Journ. Appl. Phys.* 1989. **65**. P. 1747.
11. **Варавин В. С., Сидоров Ю. Г., Ремесник В. Г. и др.** Приготовление пленок $Cd_xHg_{1-x}Te$ методом паровой эпитаксии HgTe на подложках CdTe с последующей взаимодиффузией // *Физика и техника полупроводников*. 1994. **28**. С. 577.
12. **Talochkin A. B., Varavin V. S., Dvoretzky S. A., Sidorov Yu. G.** Raman study MBE HgCdTe layers // *Proc. of the Eight Intern. Conf. on Narrow Gap Semiconductor* /Eds. S. C. Chen et al. Singapore: World Scientific, 1998. P. 38.
13. **Сидоров Ю. Г., Дворецкий С. А., Васильева Л. Ф.** Возможный источник неконтролируемого легирования эпитаксиальных слоев арсенида галлия в газотранспортном методе // *Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок*. Новосибирск: Наука, 1975. Ч. 2. С. 161.
14. **Сидоров Ю. Г., Васильева Л. Ф., Сидорова А. В. и др.** Отклонение поведения примесей от равновесного при эпитаксии // *Рост и легирование полупроводниковых кристаллов и пленок*. Новосибирск: Наука, 1977. Ч. 1. С. 272.
15. **Weiser K. J.** Theoretical calculation of distribution coefficient of impurities in germanium and silicon. Heats of solid solution // *Phys. Chem. Sol.* 1958. **7**. P. 118.
16. **Stull D. R., Sinke G. C.** Thermodynamic properties of the elements // *Published Amer. Chem. Soc.* 1956.
17. **Карапетьянец М. Х., Карапетьянец М. Л.** Основные термодинамические константы неорганических и органических веществ. М.: Химия, 1968.
18. **Бобылев Б. А., Кравченко А. Ф.** Влияние концентрации свободных носителей заряда на упругие постоянные арсенида галлия // *Акуст. журн.* 1967. **13**. С. 286.
19. **Pauling L.** The nature of the chemical bond // 3rd ed. Ithaca. N. Y.: Cornell University Press, 1960. P. 246.
20. **Sha Y.-G., Chen K.-T., Fang R., Brebrick R. F.** Gibbs free energy of formation and partial pressure of Hg over Te- saturated HgTe(c) between 385 and 724 K // *Journ. Electrochem. Soc.* 1989. **136**. P. 3837.
21. **Su C.-H., Liao P.-K., Brebrick R. F.** Partial pressure over pseudobinary solid solution $Hg_{1-x}Cd_xTe(s)$ for $x = 0.7$ and 0.95 and over four Te-rich ternary melts // *Journ. Electrochem. Soc.* 1985. **132**. P. 942.
22. **Jorke H.** Surface segregation of Sb on Si(100) during molecular beam epitaxy growth // *Surface Sci.* 1988. **193**. P. 569.
23. **Barnett S. A., Greene J. E.** Si molecular beam epitaxy: A model for temperature dependent incorporation probabilities and depth distributions of dopants exhibiting strong surface segregation // *Surface Sci.* 1985. **151**. P. 67.

*Институт физики полупроводников СО РАН,
E-mail: dvor@isp.nsc.ru*

*Поступила в редакцию
21 марта 2001 г.*