

Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体的 Cd 气氛扩散热处理研究

李万万[†] 孙 康

(上海交通大学金属基复合材料国家重点实验室, 上海 200030)

(2006 年 8 月 17 日收到 2007 年 4 月 6 日收到修改稿)

将生长得到的 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在 Cd 气氛下及不同的温度条件下进行了退火处理. 借助已建立的退火处理过程中 Cd_{1-x}Zn_xTe 晶体材料电阻率及导电类型变化和扩散杂质的扩散系数之间关系的模型, 结合实验数据, 获得了 1073 K、973 K 和 873 K 下 Cd 在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中的扩散系数, 并估算了其激活能. 通过使用获得的扩散系数, 研究了在不同温度及饱和 Cd 气氛下, 退火时间对 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体电阻率分布及导电类型等的变化的影响.

关键词: Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te, 热处理, Cd 气氛, 扩散系数

PACC: 6110M, 8140E

1. 引 言

Cd_{1-x}Zn_xTe 晶体是重要的 II-VI 族宽禁带半导体材料, 特别是高阻的 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在 X 射线、 γ 射线核探测器等领域有着重要的应用价值^[1-3]. 对于采用垂直布里奇曼法生长的 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体, 由于生长过程的熔体中的 Cd 组元蒸气压相对较高, 易挥发损失而产生一定量的 Cd 空位 V_{Cd} , 并难以通过控制 Cd 分压来精确补偿, 导致晶体的化学计量比发生偏离, 从而降低了晶体的电阻率, 难以满足器件制作的要求. 而通过将 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在 Cd 气氛下进行扩散热处理以提高晶体电阻率等重要电学性能是较为常用的选择. 目前有关 Cd_{1-x}Zn_xTe 晶体 (或者 CdTe 晶体) 的热处理文献报道较为丰富^[4-6], 但是大部分文献仅仅给出了热处理参数与晶片热处理后电学性能的定性关系, 而未对热处理过程的本质问题进行进一步探讨. 我们曾对 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在 In 气氛下热处理进行了研究, 并建立了热处理过程中 Cd_{1-x}Zn_xTe 晶体材料电阻率及导电类型变化和扩散杂质的扩散系数之间关系的模型^[7].

由于将 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在 Cd 气氛的条件下进行热处理同样为一扩散过程, 因此本文将借助所建立的模型, 结合系列实验数据, 尝试推算在 1073 K 至 873 K 的温度范围内 Cd 原子在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体

中的扩散系数并详述其推算方法. 然后讨论不同温度条件下, 热处理时间等对处在饱和 Cd 气氛下的 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体热处理后的电阻率分布与导电类型等产生影响的实质.

2. 热处理过程中 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体电阻率和导电类型变化模型

2.1. Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体热处理过程中的扩散原子的存在形式

由于 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 材料在其熔点附近, 组元 Cd, Zn 的蒸气压远大于组元 Te 的蒸气压, 因此在生长态的未掺杂 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中, 由于 Cd 和 Zn 原子的逃逸所形成的受主缺陷 V_{Cd}, V_{Zn} 在室温下将电离产生空穴而增加晶体中的载流子浓度, 导致晶体电阻率 ρ 较低, 并通常呈现 p 型导电类型. 对该类 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在 Cd/Zn 气氛的条件下进行热处理, 其实质为气氛中的 Cd/Zn 原子以一定的形式扩散进入 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体内部的过程, 而该过程能够改变晶体的电学性能是由于气氛原子扩散进入晶体内部后能补偿上述受主缺陷的缘故. 由于 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中 Cd 组元分压 P_{Cd} 大于 Zn 分压 P_{Zn} 100 倍以上, 因而生长态的 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中的缺陷主要为 V_{Cd} . 在以下模型中只讨论气氛中 Cd 原子对晶体中

[†] E-mail: wwli@sjtu.edu.cn

V_{Cd} 的补偿作用。

对于将 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体在饱和 Cd 气氛下热处理过程,是气氛中的 Cd 原子首先扩散并溶解在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体的表面,形成施主缺陷 Cd_i,然后施主缺陷 Cd_i 通过扩散进入 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体内部,Cd_i 经电离后产生的自由电子来补偿晶体内部主要由 V_{Cd} 提供的空穴。由于 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中 Zn 的含量很少,在热处理条件下 Cd 原子在晶体内部的扩散

行为与 CdTe 类似,因此我们利用 CdTe 的高温点缺陷平衡关系(见表 1),作出了不同温度下 CdTe 中各种点缺陷浓度随 Cd 的压强变化的关系图,如图 1 (a)(b)(c)。从图中可以看出,在 873 K、973 K 和 1073 K 的温度及过饱和 Cd 压下(高于平衡蒸气压),电离 Cd_i 的浓度远大于其他缺陷的浓度,因此在上述条件下扩散进 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中的 Cd 原子主要以 Cd_i 的形式存在。

表 1 CdTe 的类化学平衡方程式($K_i = K_i^0 \exp(-H_i/kT)$)及相关的参数^[8,9]

热化学平衡方程式	平衡常数	K^0	$H(E)$ eV
$CdTe \rightleftharpoons Cd_V + 1/2Te_{2V}$	$K^{SV} = P_{Cd} P_{Te2}^{1/2}$	8.3×10^{10}	3.0
$0 \rightleftharpoons e^- + h^+$	$K_i = [h^+][e^-]$	5×10^{39}	1.5
$Cd_{Cd}^{\times} + e^- \rightleftharpoons Cd_V + V_{Cd}^-$	$K_{V_{Cd}^-} = [V_{Cd}^-][h^+]^{-1} P_{Cd}$	8×10^6	2.08
$Cd_{Cd}^{\times} + 2e^- \rightleftharpoons Cd_V + V_{Cd}^{2-}$	$K_{V_{Cd}^{2-}} = [V_{Cd}^{2-}][h^+]^{-2} P_{Cd}$	1×10^{-15}	1.14
$Cd_V \rightleftharpoons Cd_i^{2+} + 2e^-$	$K_{Cd_i^{2+}} = [Cd_i^{2+}][h^+]^2 P_{Cd}^{-1}$	1×10^{60}	2.09
$CdTe + e^- \rightleftharpoons Cd_V + Te_i^-$	$K_{Te_i^-} = [Te_i^-][h^+]^{-1} P_{Cd}$	4×10^2	1.2
$Cd_V \rightleftharpoons Cd_{Cd}^{\times} + V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K_{V_{Te}^{2+}} = V_{Te}^{2+} n^2 P_{Cd}^{-1}$	3×10^{57}	1.47

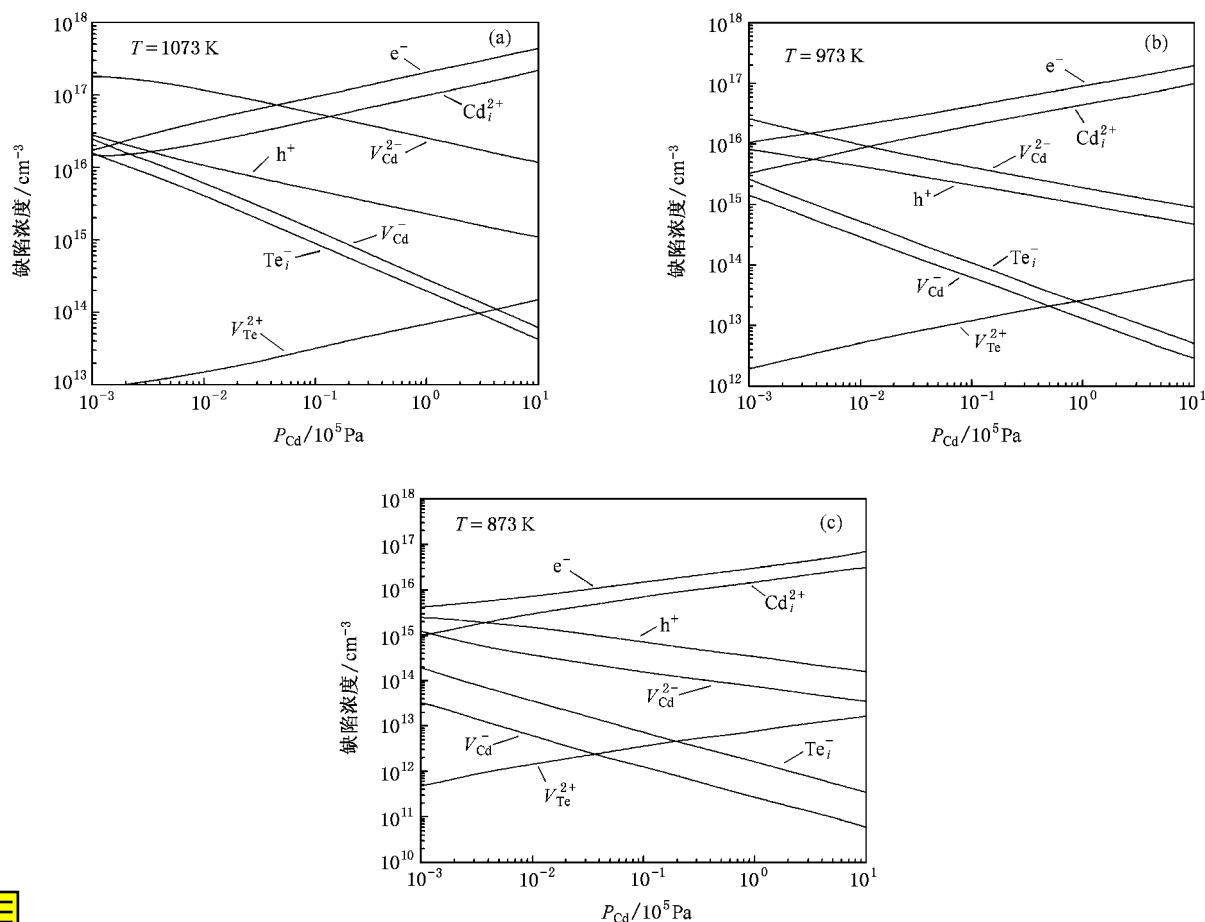


图 1 不同温度 CdTe 中电离点缺陷的浓度随 Cd 压变化的关系 (a) 1073 K ;(b) 973 K ;(c) 873 K

2.2. 在 Cd 气氛热处理过程的电阻率和导电类型变化模型

根据 Shewmon 的观点^[10],对于厚度有限的样品,如果扩散到厚度以外的溶质与总溶质浓度的比值较小时,可近似认为该扩散为无限源扩散.一般对 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片的热处理时间不超过 360 h. 我们采用下面的公式对该比值进行了计算:

$$P = \frac{\int_{x'}^{\infty} e^{-x^2/4Dt} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/4Dt} dx}, \quad (1)$$

其中 $x' = 0.2 \text{ cm}$ 为样品的厚度. 计算结果表明,当扩散时间为 360 h, 扩散系数分别为 $1 \times 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$, $1 \times 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ 和 $1 \times 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s}$ 时,比值 P 分别为

4.3×10^{-5} , 8.37×10^{-36} 和 0, 显然比值都非常小,因此在该情况下 Cd 扩散进入晶体内部的过程相当于一表面浓度恒定的半无限大扩散偶的扩散过程.

根据已建立的热处理过程的模型^[7],结合相关的参数就可以获得 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体在 Cd 气氛热处理过程的电阻率和导电类型变化模型. 如果我们知道 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体在热处理前的电阻率、导电类型以及在热处理温度下 Cd 在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体表面的浓度和在晶体中的扩散系数,就可以预测在经过一定热处理时间后 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体的电阻率和导电类型. 当然如果我们知道热处理前后 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体的电阻率和导电类型,就可以推算在热处理温度下 Cd 在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体中的扩散系数. 表 2 给出了上述模型中的一些参量的取值.

表 2 模型中所用到的参数

(a)

参量	$\mu_n/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\mu_p/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$N_c^*/10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$E_i(\text{Cd})/\text{eV}$	$E_g(300 \text{ K})/\text{eV}$	$k_i(300 \text{ K})/10^{13} \text{ cm}^{-3}$
参量	700	30	9.181	0.5	1.578	1.654
文献	[11]	[11]	[12]	[13]	[14]	[9],[14]

(b)^[15]

温度/K	1073	1073	1073	973	973	973	873	873	873
$P_{\text{Cd}}/10^5 \text{ Pa}$	2.02	1.82	1.64	1.01	0.81	0.63	0.72	0.56	0.33
$(N_{\text{Cd}_i})_s/10^{17} \text{ cm}^{-3}$	3.1	3.0	2.8	0.13	0.12	0.11	0.085	0.082	0.07

3. 实验过程

实验所采用的未掺杂的 p 型 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体均由低压布里奇曼法生长获得. 将生长好的晶锭沿 (111) 面切割成约 2 mm 厚的晶片. 晶片经双面研磨、机械抛光后,采用 BM 腐蚀液(5% Br + 甲醇) + LB 腐蚀液(2% Br + 20% 乳酸 + 乙二醇)进行化学腐蚀抛光,并用去离子冲洗,然后放入真空烘箱中烘干备用. 热处理炉采用二温区的水平电阻炉. 将作为热处理源的高纯合金 $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x$ 放入石英管的源端,实验中通过调节源端的温度来获得不同的饱和 Cd 分压和平衡 Zn 分压($\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x$ 合金中的 Cd/Zn 分压随着不同温度和组成变化的关系见文献[16]),而样品则放置在石英管的另一端并位于热处理炉的另一恒温区. 在真空度 $\leq 2 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ 时真空封管后将石英坩埚置于热处理炉中,热处理结束后将石英坩埚冷却至室温.

实验采用冷热探针法测定晶片的导电类型,采用 HP4140B PA 型微电流计测量样品的暗电流-电压 ($I-V$) 特性来获得晶片的电阻 R . 然后利用公式 $\rho = R \times S/d$ 求得晶片热处理前后的电阻率,其中 d 为晶片厚度, S 为晶片表面积.

4. Cd 在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体中的扩散系数以及激活能的估算

4.1. 估算方法

为了获得 Cd 在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片中的扩散系数,我们通过控制 Cd 的分压,使 Cd 原子在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片中的溶解度达到饱和,因而 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片在热处理一定时间后的电阻率将趋于定值. 由于此条件下 Cd 在晶片中的扩散可近似为无限恒定源的扩散过程,根据所建立的 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体热处理后电学性能变化的模型^[7],在一定扩散温度下某一时

刻,某一深度处,材料的电阻率是扩散系数的函数.因此,如果我们可通过实验获得热处理前后 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体的宏观电阻率和导电类型等实验数据,再结合模型中需要用到的参数即可通过模型逆推出不同温度下 Cd 原子在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶片中的扩散系数.将这些扩散系数值进行自然对数求值后再对温度倒数的 1000 倍作图,然后将获得的数据点进行线性拟和后即可得到一条直线,而该直线斜率的 $\frac{k}{1000}$

(其中 k 为玻耳兹曼常数)即为 Cd 原子在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中的扩散激活能.为此,我们分别在 1073 K, 973 K 和 873 K 条件下,控制 Cd 气氛分压 P_{Cd} 远高于 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶片中 Cd 组元的平衡分压,分别达到 2.02×10^5 Pa, 1×10^5 Pa 和 0.72×10^5 Pa,进行了一系列的热处理实验,实验和推算结果分别见表 3 和表 4,在推算中需要用到的其他参数见表 2.

表 3 Cd 气相扩散实验结果

晶片编号	合金源及源端温度/K	Cd/Zn 分压值/Pa	晶片端热处理温度/K	热处理时间/h	电阻率/ $\Omega \cdot \text{cm}$		热处理后导电类型
					处理前	处理后	
CZT30-13	Cd _{0.993} Zn _{0.007}	2.02×10^5	1073	1	7.14×10^4	2.77×10^7	p
CZT30-14				3	7.10×10^4	4.34×10^7	n
CZT30-1				12	7.01×10^4	1.13×10^8	n
CZT30-2				24	6.93×10^4	1.33×10^8	n
CZT30-3				72	7.15×10^4	2.89×10^8	n
CZT30-10				144	7.10×10^4	5.17×10^8	n
CZT30-6				192	7.08×10^4	2.56×10^6	n
CZT30-7	360	7.12×10^4	1.92×10^4	n			
CZT20-1	Cd _{0.9985} Zn _{0.0015}	1.01×10^5	973	12	7.03×10^4	2.85×10^7	p
CZT20-2				24	7.00×10^4	5.63×10^7	n
CZT20-3				72	7.14×10^4	9.58×10^7	n
CZT20-4				144	7.05×10^4	1.58×10^8	n
CZT20-5				192	6.83×10^4	1.84×10^8	n
CZT20-6				360	7.27×10^4	2.18×10^8	n
CZT10-1	Cd _{0.993} Zn _{0.007}	7.2×10^4	873	12	7.01×10^4	2.5×10^6	p
CZT10-2				24	7.20×10^4	8.02×10^6	p
CZT10-3				72	6.93×10^4	1.23×10^7	p
CZT10-4				144	7.21×10^4	2.49×10^7	p
CZT10-5				192	7.11×10^4	3.15×10^7	p
CZT10-6				360	7.14×10^4	4.91×10^7	p

4.2. 估算结果

通过使用已建立的模型,结合上述估算方法,我们获得了 1073 K, 973 K 和 873 K 条件下 Cd 在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中的扩散系数(见表 4),分别为 1.464×10^{-10} , 1.085×10^{-11} 和 $4.167 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$,通过线性拟合后得到了 Cd 在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中扩散系数的表达式

$$D_{Cd}(T) = 2.33 \times \exp\left(\frac{-2.38}{kT}\right), \quad (2)$$

式中 2.38 为 Cd 原子在 Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te 晶体中的扩散激活能,单位为 eV. 该表达式适用的温度范围为

873—1073 K.

表 4 扩散系数推算结果

温度/K	1073					
热处理时间/h	12	24	72	144	192	360
扩散系数/ $10^{-10} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	2.718	0.9410	1.572	1.875	0.9356	0.7420
平均扩散系数/ $10^{-10} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	1.464					
温度/K	973					
热处理时间/h	12	24	72	144	192	360
扩散系数/ $10^{-11} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	0.9709	1.079	1.007	1.151	1.259	1.043
平均扩散系数/ $10^{-11} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	1.085					
温度/K	873					
热处理时间/h	12	24	72	144	192	360
扩散系数/ $10^{-13} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	2.570	5.128	3.500	4.851	4.749	4.200
平均扩散系数/ $10^{-13} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	4.167					

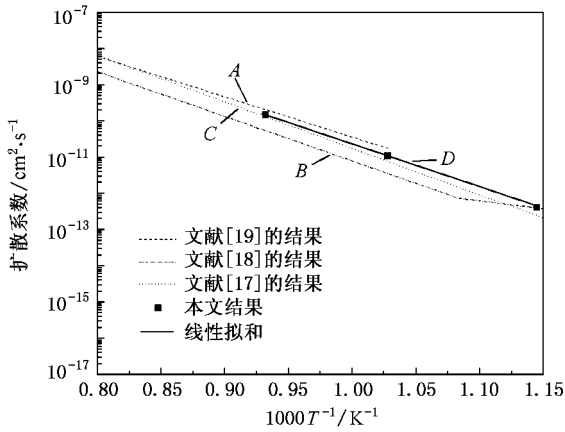


图2 Cd原子在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体与 CdTe 晶体中扩散系数的比较

为了验证我们所建立模型的合理性,我们曾在研究In原子在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体中扩散系数的报道中用我们建立的模型对Khattak等^[20]报道的实验数据(这些数据为采用Schottky barrier capacitance和deep-level transient spectroscopy等技术获得的,反映了经过In气氛扩散热处理后浅能级施主杂质在 CdTe 晶片中的浓度分布情况)进行了拟合,获得的In在 CdTe 中的扩散系数和其他文献的结果非常接近.由于没有Cd原子在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体中扩散系数的相关报道,因此我们将推算出来的结果与不同文献 CdTe 的研究结果进行了比较,如图2所示.从图中可以看出,我们所得的数据较接近于Jones等人^[17]的研究结果: $50 \times \exp\left(\frac{-2.47 \text{ eV}}{kT}\right)$ (623 K—1073 K),并介于Borsenberger等人^[18]和Whelan等人^[19]所提供的数据之间.

5. $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片热处理后电阻率分布和导电类型变化分析

为了研究 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片在一定热处理温度下经过不同时间热处理后电阻率和导电类型变化的规律.我们将获得的Cd在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片中的扩散系数和不同温度下在Cd的饱和气氛下 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片表面Cd间隙的浓度值,以及表2中所列出的其他参数代入模型中可获得 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片厚度方向的位置与该位置薄层电阻率之间的关系.由此我们便可模拟出在1073 K,973 K和873 K温度并处于过饱和Cd气氛下热处理的 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$

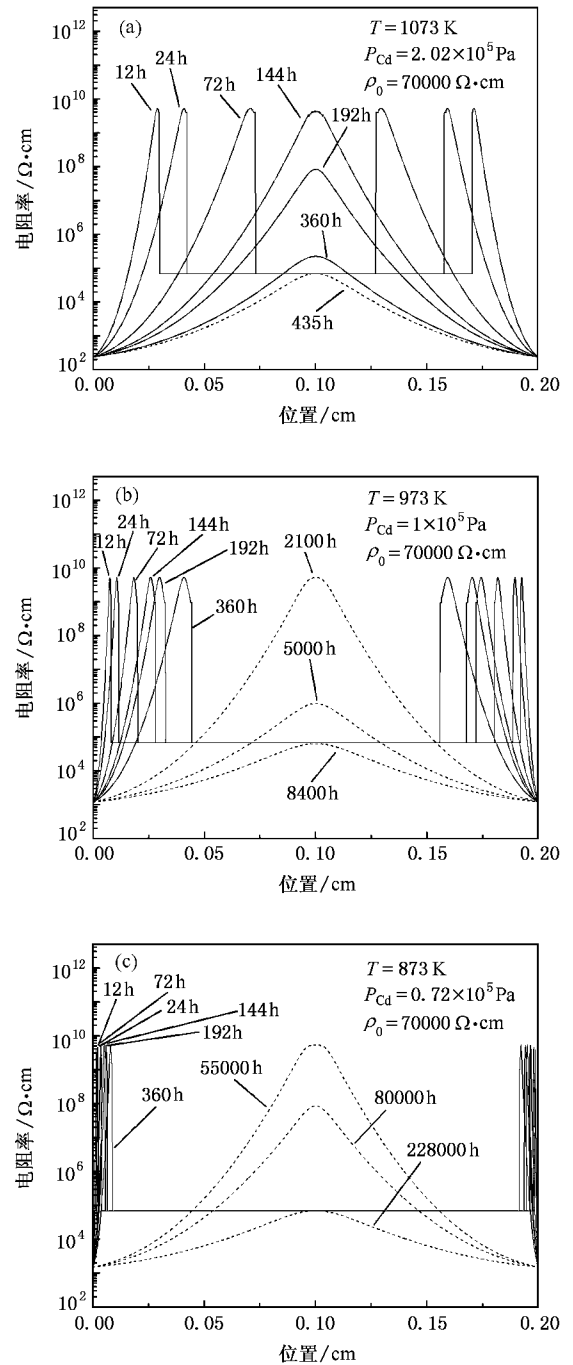


图3 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片在Cd气氛下经不同温度和时间热处理后电阻率在厚度方向上的模拟分布 (a)1073K (b)973K (c)873K

晶片热处理后的电阻率在晶片厚度方向上的分布曲线,如图3(a)(b)(c)所示.从图中发现, $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片分别在1073 K,973 K和873 K温度下热处理后,晶片在厚度方向上各处的电阻率分布与在In气氛下热处理的 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片情况类似,均为在表面处下降后向着晶片中心方向逐渐升高到最高值,

随后再降低至起始值。随着热处理时间的增加,电阻率最高值的位置向晶片中心方向移动,同时晶片电阻率提高部分的面积也不断扩大。在 1073 K、973 K 和 873 K 温度下,热处理时间分别为 144、2100 和 55000 h,晶片中电阻率最高值的位置分别转移至晶片中心位置,但是在 In 气氛下热处理的 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片情况下,晶片在 1073 K、973 K 和 873 K 温度下达到电阻率的峰值所需的热处理时间却分别为 6、140 和 920 h。显然,这是由于 In 原子在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片中的扩散系数大于 Cd 原子所致。

图 4 中比较了 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片宏观电阻率和导电类型分别在 1073 K、973 K 和 873 K 时经过不同时间热处理后变化的模拟曲线和实验结果。由图可见模拟曲线和实验结果比较符合。从模拟曲线中还可以看出,在一定的热处理温度条件下,退火后晶片的宏观电阻率均随热处理时间增加先上升后下降,各自存在一个峰值,但是各自达到电阻率的峰值所需的热处理时间是不同的,分别为 144、2100 和 55000 h。在 1073 K 条件下热处理实验获得的实验数据与模拟曲线符合较好。但是当热处理温度为 973 K 和 873 K 时,热处理后晶片总的电阻率随处理时间的增加单调上升,并没有得到电阻率下降的结果,其原因可能是于在 973 K 和 873 K 下,Cd 在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片中的扩散系数较小(分别为 1.085×10^{-11} 和 $4.167 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$),在有限的时间内扩散进 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片中 Cd 原子形成 Cd_i 提供的自由电子仍不足以导致晶片的宏观电阻率降低。而从模拟曲线中也可以看出,当热处理温度为 973 K 和 873 K 时,晶体电阻率达到峰值所需要的时间分别长达 2100 h 和 55000 h (87.5 d 和 2291.7 d),远远超过了一般的退火时间。

关于晶片经热处理导电类型发生转变的条件,我们的实验和模拟结果都表明:在 1073 K 和 973 K 温度下,晶片的导电类型在短时间内(分别为 2 h 和 20 h)发生转变,而在 873 K 温度下,晶片的导电类型理论上需要长时间(730 h)才发生改变,远超过一般的退火时间,在我们的实验中也并没有发现晶片的导电类型发生改变。由于半导体材料的类型是由两种载流子对于电导的贡献何者为大所决定,再加上在 CdZnTe 材料中电子的迁移率几乎比空穴大一个数量级^[3],因此在高温扩散进行不久后材料的导电类型就发生了改变,而在较低温度时却长时间不发生改变是合理的。我们将本文的实验和模拟结果与我

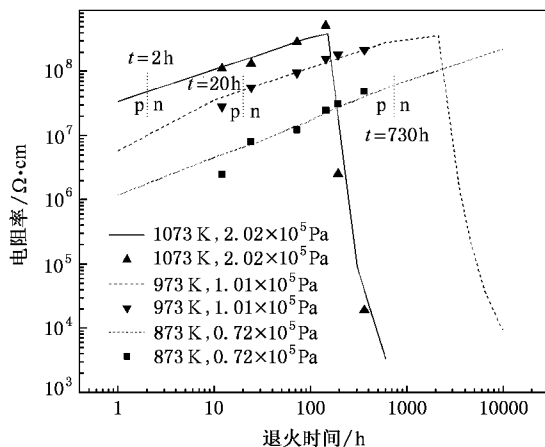


图 4 不同温度下 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片单独在过饱和 Cd 气氛下热处理后电阻率和导电类型的变化

们实验条件类似的 Triboulet^[21]等人的实验结果作比较发现,同样在 973 K 温度时和在过饱和 Cd 气氛下进行热处理,Triboulet 等人也在短时间内直接将 p 型材料转变为了 n 型材料,但是在热处理后晶片的电阻率是降低还是升高上存在分歧。我们认为造成这种差别的原因是由于两者在电学性质测量时电极排布上的差别,Triboulet 等人采用范得堡法测量晶片电阻率,而我们采用冷热探针法进行测量^[7]。将两种电极排布的方法所得到的不同的测量结果相比较后,可以认为我们所采用的方法从数据上反映了晶片中电阻率变化的实质,因此更为合理。

6. 结 论

1. 根据所建立的模型与实验数据相结合,推算获得了 Cd 原子在 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶体中的扩散系数。将获得的结果与文献中报道的 Cd 在 CdTe 晶片中的扩散系数进行了比较,发现与报道^[14]所提供的 Cd 原子在 CdTe 晶片中的扩散系数数据较为接近。

2. 利用所获得扩散系数,模拟了 $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片经热处理后 Cd 原子在晶片厚度方向上的分布规律以及积分电阻率变化规律发现:在热处理温度范围内, $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ 晶片经热处理后在厚度方向上的电阻率分布不均匀;晶片热处理后的积分电阻率的模拟曲线和实验数据较为符合。

3. 在电活性杂质的气氛下对半导体材料进行热处理,根据获得的该电活性杂质在半导体晶片的表面浓度以及热处理前后电阻率的变化等参数,然后应用我们所建立的模型进行估算可获得该条件下

电活性杂质在半导体材料中的扩散系数.

- [1] Lachish U 2001 *J. Cryst. Growth* **225** 114
- [2] Verger L , Bonnefoy J P , Glasser F , Ouvrier-Buffet P 1997 *J. Electron. Mater.* **26** 738
- [3] Schlesinger T E , Toney J E , James R B , Franks L , Yoon H 2001 *Mater. Sci. Eng. Re-Rep.* **32** 116
- [4] Li W W , Sang W B , Zhang B , Min J H , Yu F 2004 *J. Mater. Sci. & Technol.* **20**(6) 703
- [5] Lyahovitskaya V , Kaplan L , Goswami J , Cahen D 1999 *J. Cryst. Growth* **197** 106
- [6] Lyahovitskaya V , Chernyak L , Greenberg J , Kaplan L , Cahen D 2000 *J. Crystal Growth* **214/215** 1155
- [7] Li W W , Sun K 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1921 (in Chinese) [李万万、孙康 2006 物理学报 **55** 1921]
- [8] Fochuk P M , Korovyanko A A , Turkevich I R , Panchuk O E 2002 *Inorganic Materials* **38** 350
- [9] Fochuk P , Korovyanko O , Panchuk O 1999 *J. Cryst. Growth* **197** 603
- [10] Shewmon P G 1963 *Diffusion in Solids* (New York : McGraw-Hill) p9
- [11] James R B , Yao H W , Lee E Y , Wright G W , Olsen R W , Cross E S , Li L , Lu F , Komar V K , Nalivaiko D , Luke P , Amman M , Lee J , Schlesinger T E , Burtalia J 2000 *Proceedings of the Presentation at the SPIE Conference on Hard X-ray , Gamma-ray and Neutron Detector Physics II* **4141** , San Diego , CA
- [12] Nobel D de 1959 *Philips Res. Rept* **14** 431
- [13] Chang Y C , James R B 1999 *Proceedings of SPIE- Hard X-Ray , Gamma-Ray , and Neutron Detector Physics* **3768** 381
- [14] Samuel L , Brada Y , Burger A , Roth M 1987 *Phys. Rev. B* **36** 1168
- [15] Vydyanath H R , Ellsworth J , Kennedy J J , Dean B , Johnson C J , Neugebauer G T , Sepich J , Liao Pok-Kai 1992 *J. Vac. Sci. Technol B* **10** 1476
- [16] Zhang B 2004 *Study on the Annealing of CdZnTe Nuclear Detector Material* p20 (Thesis : in Chinese) [张斌 2004 CdZnTe 核探测器材料的热处理研究 上海大学硕士学位论文 p20]
- [17] Jones E D , Stewart N M 1987 *J. Crystal Growth* **84** 289
- [18] Borsenberger P M , Stevenson D A 1968 *J. Phys. Chem. Solids* **29** 1277
- [19] Whelan R C , Shaw D 1967 II - VI *Semiconductor Compounds* , edited by Thomas D G (Benjamin , New York) p451
- [20] Khattak G. M , Scott C G 1998 *J. Phys. : Condens. Mater.* **10** 2807
- [21] Triboulet R , Marfaing Y 1981 *J. Crystal Growth* **51** 89

Annealing of $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ in cadmium vaporLi Wan-Wan[†] Sun Kang

(The State Key Laboratory of Metal Matrix Composites , Shanghai Jiaotong University , Shanghai 200030 , China)

(Received 17 August 2006 ; revised manuscript received 6 April 2007)

Abstract

$\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ wafers grown by vertical Bridgman method were annealed in cadmium vapor at different temperatures. The formerly established model correlating resistivity and conduction type of CdZnTe with the main diffusion parameter-diffusion coefficient is used in combination with the analysis of our experimental data ($D_{\text{Cd}} = 1.464 \times 10^{-10}$, 1.085×10^{-11} and $4.167 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$), and the values of Cd self-diffusion coefficient in $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ at 1073K , 973K and 873K have been obtained , which coincide closely with the Cd self-diffusion coefficient in CdTe provided by different authors. With the data , the effect of annealing time on the resistivity and change of conduction type of $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ wafers annealed in saturated Cd vapor at 1073K , 973K and 873K were simulated , and good agreement was found.

Keywords : $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, annealing , Cd vapor , diffusion coefficient**PACC :** 6110M , 8140E[†] E-mail : wwli@sjtu.edu.cn