

*Смирнов Радим Юрьевич,
бакалавр,
Национальный исследовательский
ядерный университет «МИФИ»,
г. Москва,*

*Топоров Николай Валерьевич,
бакалавр,
Национальный исследовательский
ядерный университет «МИФИ»,
г. Москва,*

*Третьяков Ярослав Сергеевич,
бакалавр,
Национальный исследовательский
ядерный университет «МИФИ»,
г. Москва,*

*Климов Евгений Александрович,
к.ф.-м.н., начальник научно-исследовательского центра
АО «НПО Орион»,
г. Москва,*

**СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА
ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК CdTe , ПОЛУЧЕННЫХ НА
ПОДЛОЖКАХ GaAs**

*Аннотация: Работа посвящена систематическому исследованию
структурных и электронных свойств эпитаксиальных пленок теллурида*

кадмия (CdTe), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложках арсенида галлия (GaAs) с ориентацией (100). Показано, что пленка, выращенная при 400 °С с предварительной деоксидацией подложки (образец CdTe/GaAs №2), обладает наименьшей шероховатостью ($R_q \sim 0.6$ нм), монокристаллической структурой и наиболее интенсивной экситонной фотолюминесценцией (ФЛ). Установлено, что использование буферного слоя ZnTe позволяет сохранить ориентацию эпитаксиального слоя (001), наследуемую от подложки, однако приводит к ухудшению морфологии поверхности.

Ключевые слова: CdTe, GaAs, ZnTe, молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ), структурные свойства, морфология поверхности, рентгеновская дифракция, фотолюминесценция.

**Smirnov Radim Yurievich, Bachelor,
National Research Nuclear University
"MEPhI", Moscow**

**Toporov Nikolay Valerievich, Bachelor,
National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow**

**Tretyakov Yaroslav Sergeevich, Bachelor,
National Research Nuclear University
"MEPhI", Moscow**

**Klimov Evgeny Aleksandrovich,
Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Head of the Research Center,
JSC "NPO "Orion", Moscow**

STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF EPITAXIAL CDTE FILMS ON (100) GAAS SUBSTRATES

Abstract: *This work is devoted to a systematic study of the structural and electronic properties of epitaxial cadmium telluride (CdTe) films grown by molecular beam epitaxy (MBE) on gallium arsenide (GaAs) substrates with (100) orientation. It is shown that the film grown at 400 °C with preliminary substrate deoxidation (CdTe/GaAs sample No. 2) exhibits the lowest roughness ($R_q \sim 0.6$ nm), a single-crystal structure, and the most intense excitonic photoluminescence. It is established that the use of a ZnTe buffer layer makes it possible to preserve the (001) orientation of the epitaxial layer inherited from the substrate; however, it leads to deterioration of the surface morphology.*

Keywords: *CdTe, GaAs, ZnTe, molecular beam epitaxy (MBE), structural properties, surface morphology, X-ray diffraction, photoluminescence.*

1. Введение

Гетероэпитаксиальные структуры на основе теллурида кадмия (CdTe) представляют значительный интерес для оптоэлектроники, включая создание фотоприемников, солнечных элементов и детекторов ионизирующего излучения. Использование подложек арсенида галлия (GaAs) является перспективным, поскольку позволяет интегрировать CdTe-устройства с хорошо развитой платформой GaAs [1]. Однако ключевой проблемой является значительное несоответствие параметров кристаллических решеток CdTe и GaAs, достигающее $\sim 14.6\%$, что приводит к возникновению высоких напряжений, плотных дислокаций и ухудшению электронных свойств пленок [2]. Для снижения дефектности применяются различные подходы: использование буферных слоев, например, ZnTe [6], оптимизация температуры роста и предростовой обработки поверхности подложки [2].

Целью данной работы является сравнительное исследование структурных и электронных свойств пленок CdTe, выращенных методом

молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложках GaAs в различных технологических условиях, для определения оптимальных режимов, обеспечивающих высокое кристаллическое совершенство и необходимые функциональные характеристики.

2. Образцы и методы исследования

В работе исследованы три образца, выращенные методом МЛЭ на подложках GaAs (100) в НИЦ «НПО «Орион»; их ростовые условия приведены в таблице 1.

Таблица 1. Ростовые условия образцов

Образец	Температура роста, °C	Наличие буферного слоя	Наличие предростового отжига
CdTe/GaAs №1	350	-	-
CdTe/GaAs №2	400	-	+
CdTe/ZnTe/GaAs	400	+	+

Образец 1 (CdTe/GaAs №1) - пленка CdTe, выращенная непосредственно на GaAs при температуре 350 °C без предварительной деоксидации поверхности подложки. Толщина ~ 0,4 мкм. Образец 2 (CdTe/GaAs №2) - пленка CdTe, выращенная на GaAs при температуре 400 °C с предварительным отжигом подложки для удаления оксидного слоя (деоксидация) под контролем RHEED. Толщина ~1,8 мкм. Образец 3 (CdTe/ZnTe/GaAs) - гетероструктура CdTe/ZnTe/GaAs, выращенная при условиях, аналогичных образцу 2, но с использованием буферного слоя ZnTe толщиной ~100 нм. Рост всех образцов осуществлялся с использованием сублимационного источника CdTe. Для образцов 2 и 3 также использовался дополнительный источник Te. Морфологию поверхности исследовали методами атомно-силовой микроскопии и оптической профилометрии с определением параметров шероховатости Ra, Rq и Sa, Sq. Оптическая микроскопия в режимах DIC и темного поля использовалась для выявления дефектов и неоднородностей поверхности. Кристаллическую структуру анализировали методом рентгеновской дифрактометрии по $2\theta/\omega$ -сканам и кривым качения. Оптические свойства изучали методом

фотолюминесцентной спектроскопии при 77 К при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм.

3. Результаты и обсуждение

Исследование с помощью АСМ показало существенные различия в рельефе поверхностей. Образец CdTe/GaAs №1 занимал промежуточное положение по шероховатости, а его поверхность была лишена четкой структурной упорядоченности. Образец CdTe/GaAs №2 характеризовался наименьшими значениями шероховатости ($R_q \sim 0.6$ нм, $R_a \sim 0.5$ нм) и проявлял выраженную ступенчатую структуру с признаками ориентации (111), что характерно для высококачественных эпитаксиальных пленок. Образец CdTe/ZnTe/GaAs показал наибольшую шероховатость ($R_q \sim 4.0$ -4.3 нм), а его поверхность состояла из крупных ориентированных пирамидальных зерен, что указывает на трехмерный механизм роста CdTe на буферном слое (Рисунок 1).

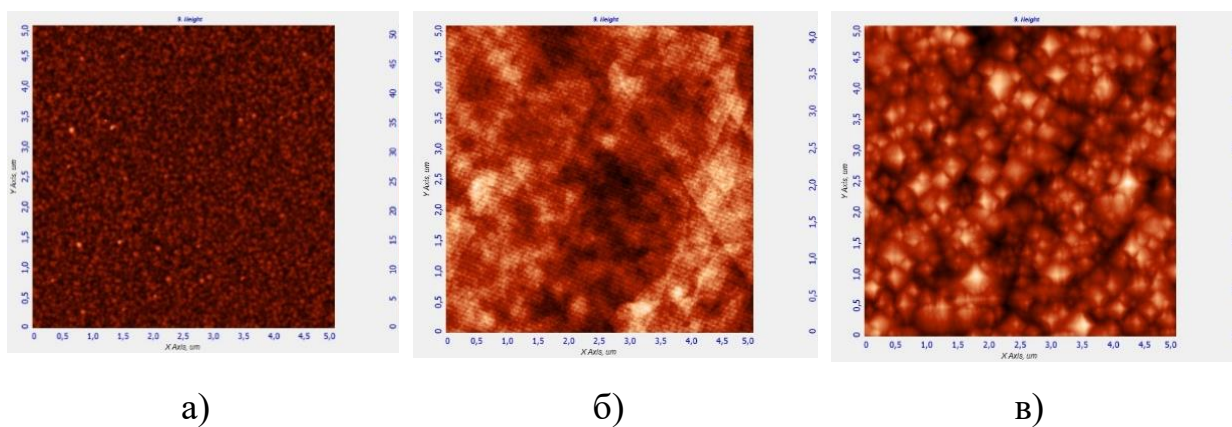


Рисунок 1 – Образцы в точке 1, площадь 5x5 мкм²: а) CdTe/GaAs №1, б) CdTe/GaAs №2, в) CdTe/ZnTe/GaAs

Данные оптической профилометрии подтвердили эти результаты: наименьшая среднеквадратичная шероховатость S_q наблюдалась для образца CdTe/GaAs №2. Оптическая микроскопия в режимах DIC и DF выявила дефекты и неоднородности на поверхности образцов, которые могли появиться из-за встраивания атома теллура на место кадмия.

Рентгенодифракционный анализ показал различие в структурном состоянии исследованных пленок. Образец CdTe/GaAs №1 является поликристаллическим. Для образца CdTe/GaAs №2 наблюдаются рефлексы CdTe 111, 222 и 333, соответствующие монокристаллической пленке с ориентацией (111) перпендикулярно поверхности. Полуширина пика CdTe(111) для образца №2 составляет $0,095^\circ$, что меньше значения для образца №1 ($0,147^\circ$) и указывает на более высокое структурное совершенство [3]. В случае CdTe/ZnTe/GaAs присутствуют рефлексы CdTe 002/004 и ZnTe 002, что подтверждает наследование ориентации (001) от подложки GaAs через буферный слой ZnTe [6].

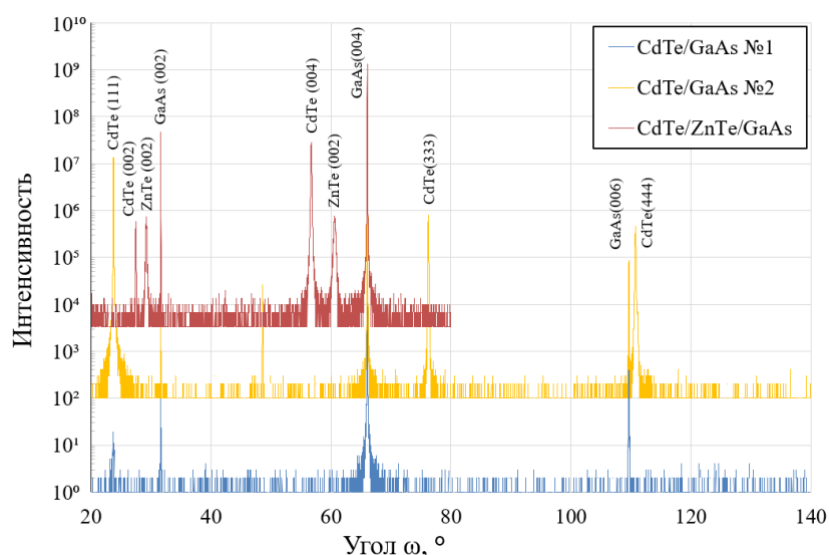


Рисунок 2 - Обзорные графики образцов, $2\theta/\omega$ сканирование

Ключевым результатом XRD-анализа является определение кристаллографической ориентации. Образец CdTe/GaAs №2, выращенный без буферного слоя, имеет ориентацию (111) перпендикулярно поверхности. В то же время, введение буферного слоя ZnTe позволяет эпитаксиальному слою CdTe наследовать ориентацию подложки (001), о чем свидетельствует наличие рефлексов (002) на дифрактограмме образца CdTe/ZnTe/GaAs. ZnTe, имея промежуточный параметр решетки, служит промежуточным слоем для роста CdTe в желаемой ориентации, что согласуется с данными работы [6].

Спектры фотолюминесценции, измеренные при 77 К, показали, что для поликристаллического образца CdTe/GaAs №1 экситонный пик практически не выражен, что говорит о доминировании безызлучательной рекомбинации. Образец CdTe/GaAs №2 обладает самой яркой и узкой экситонной люминесценцией в области ~ 1.586 эВ, что близко к табличному значению для CdTe и указывает на минимальную концентрацию безызлучательных центров рекомбинации. Для образца CdTe/ZnTe/GaAs также наблюдается экситонный пик, но его интенсивность несколько ниже, а в спектре присутствует широкая полоса в области 1.45-1.47 эВ, которая, согласно [4], может быть связана с дефектами на гетерогранице и структурными нарушениями в буферном слое.

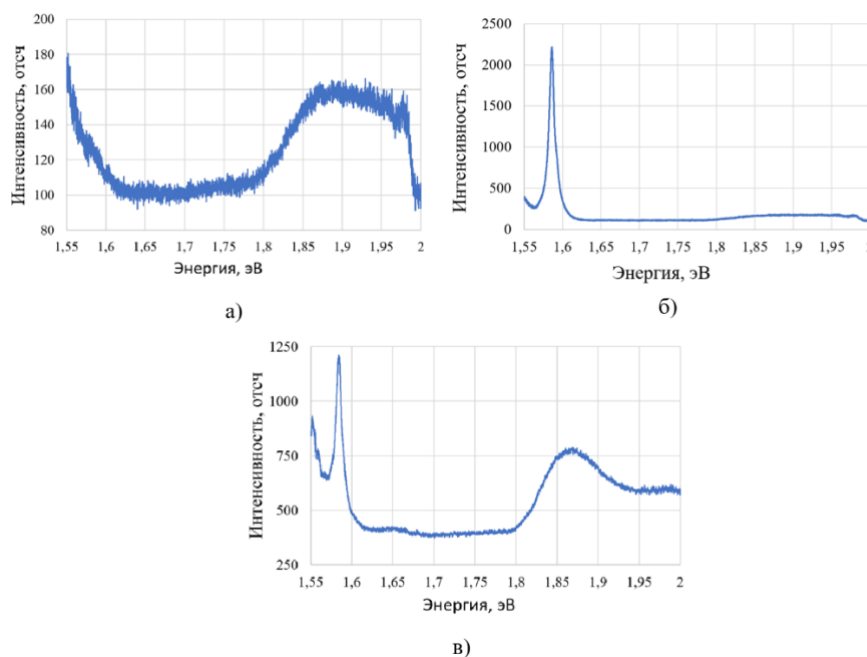


Рисунок 3 – Спектры низкотемпературной ФЛ для диапазона длин волн 620-800 нм: а) CdTe/GaAs №1, б) CdTe/GaAs №2, в) CdTe/ZnTe/GaAs

В длинноволновой области (820-1000 нм) спектры образцов №1 и №2 содержат несколько полос (1.357 эВ, 1.390 эВ, 1.411 эВ, 1.477 эВ, 1.484 эВ), идентифицированных как донорно-акцепторные переходы (Z-полоса) и излучение на структурных дефектах [4, 5] (Рисунок 4). Интенсивность этих дефектных полос в образце №2 значительно ниже, чем в образце №1, что коррелирует с данными о его лучшем структурном качестве.

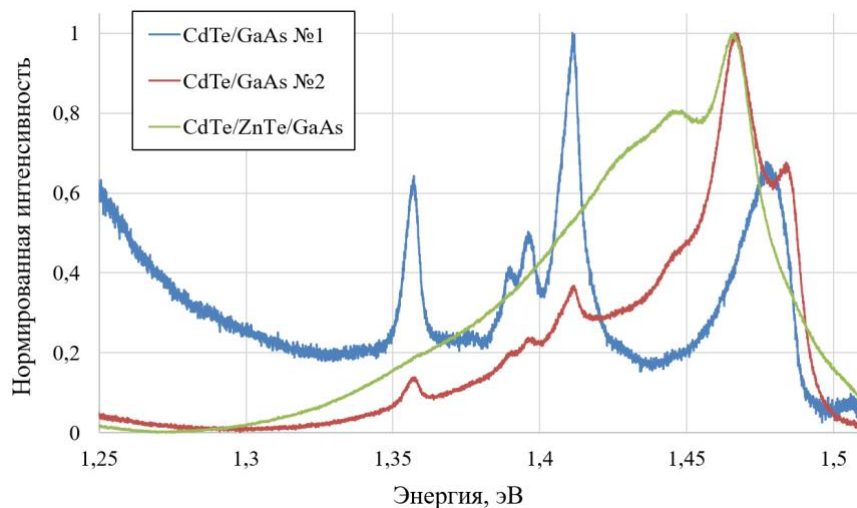


Рисунок 4 – Спектры низкотемпературной ФЛ для диапазона длин волн 820-1000 нм

Таким образом, наиболее сбалансированное сочетание морфологических, структурных и оптических характеристик получено для образца CdTe/GaAs №2. Предростовая деоксидация подложки и повышение температуры роста до 400 °С улучшают кристаллическое качество CdTe и уменьшают вклад дефектной рекомбинации. Буферный слой ZnTe позволяет сохранить ориентацию (001), однако в использованных условиях приводит к ухудшению морфологии и появлению дополнительных дефектных состояний.

4. Заключение

В результате комплексного исследования установлено, что технологические условия роста критически влияют на структурные и электронные свойства эпитаксиальных пленок CdTe на подложках GaAs. Показано, что ключевыми факторами являются предростовой отжиг подложки и температура роста. Оптимальные условия (предварительная деоксидация, $T_{\text{подл}} = 400$ °С) позволяют получить монокристаллическую пленку CdTe с ориентацией (111), обладающую наименьшей шероховатостью ($R_q \sim 0.6$ нм) и высокими оптическими характеристиками (интенсивная экситонная ФЛ). Использование буферного слоя ZnTe, хотя и позволяет сохранить ориентацию (001), наследуемую от подложки, приводит к значительному ухудшению

морфологии поверхности и появлению дополнительных дефектных состояний, что требует дальнейшей оптимизации режимов роста CdTe на ZnTe.

Использованные источники:

1. Growth of (100) CdTe films of high structural perfection on (100) GaAs substrates by molecular beam epitaxy / R. N. Bicknell [et al.] // *Applied Physics Letters*. – 1984. – Vol. 44, No. 3. – P. 313–315.
2. Влияние температуры роста на структурное совершенство пленок CdTe(111), синтезированных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs(100) / Е. А. Климов [и др.] // *Физика и техника полупроводников*. – 2025. – Т. 59, вып. 3. – С. 141–149.
3. Enriquez J. P. XRD study of the grain growth in CdTe films annealed at different temperatures / J. P. Enriquez, X. Mathew // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. – 2004. – Vol. 81, No. 3. – P. 363–369.
4. Wang C. H. Photoluminescence in CdTe grown on GaAs by metalorganic chemical vapor deposition / C. H. Wang, K. Y. Cheng, S. J. Yang // *Applied Physics Letters*. – 1985. – Vol. 46, No. 10. – P. 962–964.
5. Photoluminescence studies of CdTe films and junctions / S. Vataavu [et al.] // *Thin Solid Films*. – 2007. – Vol. 515, No. 15. – P. 6107–6111.
6. Effects of a ZnTe buffer layer on structural quality and morphology of CdTe epilayer grown on (001) GaAs by molecular beam epitaxy / J. Zhao [et al.] // *Vacuum*. – 2012. – Vol. 86, No. 8. – P. 1062–1066.