

# 同步辐射光电子能谱研究 Au/CdZnTe 的接触势垒\*

查钢强<sup>1,†</sup> 谭婷婷<sup>1</sup> 张文华<sup>2</sup> 介万奇<sup>1</sup>

(1 西北工业大学材料学院, 西安 710072)

(2 中国科技大学同步辐射国家实验室, 合肥 230029)

**摘要:** 采用分子束外延的方法在理想清洁的 CdZnTe 表面蒸金, 获得了 Au/CdZnTe 肖特基接触. 采用同步辐射光电子能谱研究了 Au 与 CdZnTe (110) 和 (111)A 面的肖特基接触势垒. 实验测得 Au 与 CdZnTe (110) 和 (111)A 面的接触势垒分别为 0.738 和 0.566eV. 运用金属感应隙态模型 (MIGS) 对实验结果进行了分析和解释.

**关键词:** CdZnTe; 肖特基势垒; 同步辐射光电子能谱; 金属感应隙态

**PACC:** 7280E; 7390; 7340

**中图分类号:** TN304.2<sup>†</sup> 6

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2007)S0-0552-03

## 1 前言

II-VI 族化合物半导体  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  (CZT) 由于其优良的光电性能, 得到了人们的广泛重视. 调整 Zn 的含量可使其晶格常数与  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  材料达到完全匹配, 是外延生长  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  薄膜材料的最重要的衬底材料. 除此之外,  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  晶体还被广泛用来制备 X 射线及  $\gamma$  射线探测器、光电调制器、太阳能电池、激光窗口等<sup>[1~3]</sup>.

目前金属与半导体的接触研究也是一个热点, 但是由于实验条件的限制, 研究较多的是 MIS 结构, 即在金属与半导体之间存在一层绝缘层, 而对于直接接触的研究较少. 对于直接接触, 金属与半导体的相互作用即界面效应对接触特性的影响十分明显. 本文采用同步辐射光研究了 Au 与 CZT (110) 和 (111)A 面直接接触的肖特基势垒高度.

肖特基接触的势垒高度可以通过  $I-V$  特性<sup>[4]</sup>、 $C-V$  特性<sup>[4]</sup> 和光发射来测定<sup>[5]</sup>. 在  $I-V$  特性测试中, 电流依赖于界面结构, 接触的横向不均匀性使整流特性变差, 而且电流中还包含热离子发射以外的电流, 这些导致计算出来的结果与实际偏差很大<sup>[6]</sup>. 而采用同步辐射光电子能谱可以精确测量其接触势垒. 接触势垒高度可以根据公式(1)得到<sup>[7]</sup>:

$$\Phi_{B,P} = |E_B - E_{V,C}| \quad (1)$$

式中  $\Phi_{B,P}$  为接触势垒高度;  $E_B$  为镀金芯能级;  $E_{V,C}$  为芯能级与价带顶的距离.

## 2 实验

本实验在中国科学技术大学国家同步辐射实验室(合肥)表面物理实验站 VSW(英国)光电子能谱仪上完成. 将采用 Bridgman 法生长的  $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$  (CZT) 晶锭沿 (110) 和 (111) 定向切割, 获得尺寸为  $5mm \times 5mm \times 0.5mm$  CZT 的单晶片. 晶片经机械抛光后采用 2% (v/v) 的 Br-MeOH 溶液进行均匀腐蚀, 除去表面损伤层, 再经丙酮和去离子水清洗后, 将样品送入谱仪的快速进样室 (FEC) 中进行测试. VSW 谱仪的本底真空度低于  $1.33 \times 10^{-8} Pa$ . CZT 晶片经反复的  $Ar^+$  刻蚀和  $300^\circ C$  真空退火后, 利用 XPS 检测无 O, C 等杂质, 说明表面已清洁. 然后在 MAXYK 公司生产的分子束外延生长室内蒸金, 金靶纯度为 99.99%, 蒸发速率为  $0.001nm/s$ , 晶片温度保持在  $300^\circ C$ . 利用同步辐射光电子能谱分别测量清洁的 CZT 和蒸发 Au 后的 Cd4d 芯能级以及价带光电子能谱.

## 3 结果与分析

以能量为 25eV 的同步辐射光作为入射光, 采用 Ta 托作为有效功函数来转换光电子的动能和电子的结合能. 在平衡条件下, 可以直接使用 Cd4d 芯能级  $E_B$  来判断接触势垒的高度, 但是由于表面的光电效应以及表面残余电荷的存在<sup>[8]</sup>, 实验中的非

\* 国家自然科学基金(批准号:50336040)和西北工业大学博士论文创新基金(批准号:CX200503)资助项目

† 通信作者. Email: zha\_gq@hotmail.com

2006-12-08 收到, 2006-12-15 定稿

平衡因素十分显著,从而导致 CZT 样品的费米边与 Ta 托并不一致.所以我们测量了 CZT (110)和 (111)A 清洁表面的价带和 Cd4d 芯能级光电子能谱,得出它们的能量差  $E_{v,c}$ ,如图 1 和 3 所示.蒸金以后,因为 Au 信号的干扰,价带顶位置变得不易辨认.但这时可以观察到 CZT 表面的费米能级.采用 MBE 法蒸金 500s 后,获得 0.5nm 厚的金电极.再测量 CZT(110),(111)面上费米边和 Cd4d 的光电子能谱,如图 2 和 4 所示.从图 2 和 4 中我们可以得到,Cd4d 相对于费米边  $E_F$  的结合能.尽管存在非平衡效应,但是因为非平衡效应对 Cd4d 芯能级和费米边的影响是一致的,因而  $E_B$  不受影响<sup>[5]</sup>.所以根据  $E_B$  和  $E_{v,c}$ ,利用公式(1),我们可以分别求出 Au 与 CZT (110)和(111)A 面的肖特基接触势垒.得出  $E_{B(110)} = 11.377\text{eV}$ ,  $E_{v,c(110)} = 10.639\text{eV}$ ,所以 Au 与 CZT (110)面的理想肖特基接触势垒  $\Phi_{B,p(110)}$  为 0.738eV.  $E_{B(111)}$  为 11.072eV,  $E_{v,c(111)}$  为 10.506eV,所以 Au 与 CZT(111)A 面的理想肖特基接触势垒  $\Phi_{B,p(111)}$  为 0.566eV.

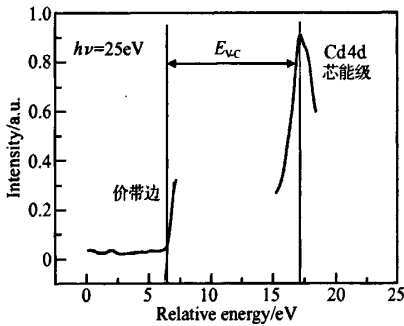


图 1 蒸金前 CZT (110)清洁表面的光电子能谱  
Fig. 1 Photoemission peak on CZT (110) surface without Au

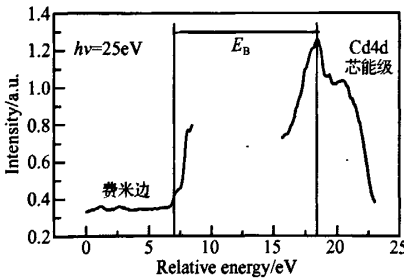


图 2 蒸金后 CZT (110)清洁表面的光电子能谱  
Fig. 2 Photoemission peak on CZT (110) surface with Au

由于 CZT 表面已经充分清洁,在 Au 与 CZT

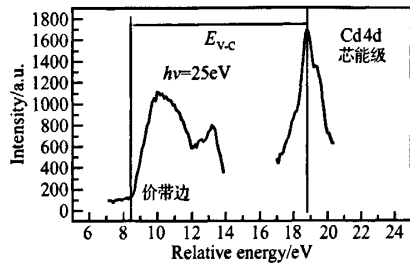


图 3 蒸金前 CZT (111) A 清洁表面的光电子能谱  
Fig.3 Photoemission peak on CZT (111) A surface without Au

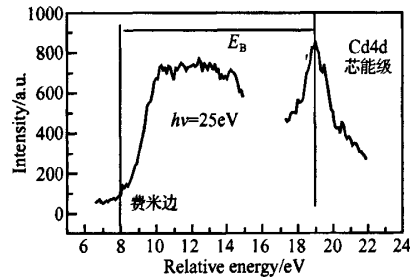


图 4 蒸金后 CZT(111) A 清洁表面的光电子能谱  
Fig.4 Photoemission peak on CZT (111) A surface with Au

之间没有任何夹杂原子或界面,形成了理想的突变界面,从而构成一个理想的肖特基势垒.这时金导带中的费米能级往往处在半导体的禁带中,其电子的波函数将渗透到 CZT 体内,形成一个波函数尾巴.诱生出半导体带隙中的局域态,称为金属感应原态 (MIGS)<sup>[11]</sup>.Monch 等人<sup>[11]</sup>认为,电子在金属和半导体中的填充取决于金属和半导体的负电性,于是肖特基势垒高度可以写为<sup>[11]</sup>

$$\Phi_{Bn} = \Phi_{vp} + S_x(X_m - X_s) \quad (2)$$

式中  $\Phi_{vp}$  为没有界面静电荷时的势垒高度;  $X_m$  和  $X_s$  分别为金属和半导体的负电性;  $S_x$  是依赖于 MIGS 能级密度的常数.如 MIGS 能级密度特别大,  $S_x$  趋近于零.

CZT 是一种极性闪锌矿晶体,(110)面为非极性面,表面能比较低,较稳定,表面成分偏析小.(111) A 面为极性面,表面 Cd 原子含有三个悬挂键,相对不稳定,而 Te 原子仅有一个悬挂键,所以稳定.我们通过 UPS 光电子能谱也证实了(111)A 面比(110)面更富 Te,而 Te 的电负性比 Cd 要高<sup>[13]</sup>,因而可以认为,CZT (111)A 面的整体电负性  $X_{s(111)}$  大于  $X_{s(110)}$ ,所以 Au 与 CZT (111)面的接触势垒  $\Phi_{B,p(111)}$  小于  $\Phi_{B,p(110)}$ .

通过同步辐射光电子能谱发现 Au 与 CZT (111)A 面接触时,发生了明显高于(110)面的电荷

转移<sup>[13]</sup>,这也从另一个角度解释了我们的实验结果.

#### 4 结 论

采用同步辐射光电子能谱测量了 Au 与 CZT 晶体(110)和(111)A 面的直接接触势垒,其测定值分别为 0.738 和 0.566eV.这是由于 CZT (111)A 面 Cd 的缺失和 Te 的富余造成 CZT (111)A 面的整体表面电负性大于(110)面表面.实验结果与 MIGS 模型相符合.

#### 参 考 文 献

- [1] Zha G Q, Jie W Q, Zhang W H, et al. Atomic and electronic structures of  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  (110) surface. *Chin Phys Lett*, 2005, 22, 2357
- [2] Doty F P, Schetzina J F, Butler J F, et al. Properties of CdZnTe crystals grown by high pressure Bridgman method. *J Vac Sci Technol B*, 1992, 10, 1418
- [3] Eisen Y, Shor A. CdTe and CZT materials for room-temperature X-ray and gamma ray detectors. *J Cryst Growth*, 1998, 184, 1302
- [4] Rhoderick E H, Williams R H. *Metal-semiconductor contacts*. 2nd ed. Clarendon, Oxford, 1988
- [5] Rickert K A, Ellis A B. X-ray photoemission determination of the Schottky barrier height of metal contacts to n-GaN and p-GaN. *J Appl Phys*, 2002, 92, 6671
- [6] Schroder D K. *Semiconductor material and device characterization*. New York: Wiley, 1990
- [7] Tung R T. Recent advances in Schottky barrier concepts. *Mater Sci Eng Rep*, 2001, 35, 1
- [8] Himpel F J. Inverse photoemission from semiconductors. *Surf Sci Rep*, 1990, 12, 1
- [9] Kurtin S, McGill T C, Mead C A. Fundamental transition in the electronic nature of solids. *Phys Rev Lett*, 1969, 22, 1433
- [10] Brillson L J. Transition in Schottky barrier formation with chemical reactivity. *Phys Rev Lett*, 1978, 40, 260
- [11] Monch W. Barrier heights of real Schottky contacts explained by metal-induced gap states and lateral inhomogeneities. *J Vac Sci Technol B*, 1999, 17, 1867
- [12] Zhang X Y. *Handbook of chemurgy*. Beijing: National Defence Industry Press, 1986; 150 (in Chinese) [张向宇. 实用化学手册. 北京: 国防工业出版社, 1986; 150]
- [13] Zha G Q, Jie W Q, Zeng D M, et al. The study of Schottky contact between Au and clean CdZnTe. *Surf Sci*, 2006, 600, 2629

## Barriers of Au/CdZnTe with Synchrotron Radiation \*

Zha Gangqiang<sup>1,†</sup>, Tan Tingting<sup>1</sup>, Zhang Wenhua<sup>2</sup>, and Jie Wanqi<sup>1</sup>

(1 School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(2 National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China)

**Abstract:** Au Schottky contact was deposited on clean CZT (110) and (111)A surfaces by molecular beam epitaxy. Synchrotron radiation photoemission spectroscopy (SRPES) was used to study the real Schottky barrier of Au/CdZnTe. The real Schottky barrier heights were measured to be 0.738 and 0.566eV, respectively. Using metal-induced gap states (MIGS) model, the results of experiment were explained.

**Key words:** CdZnTe; Schottky barrier; SRPES; metal-induced gap states

**PACC:** 7280E; 7390; 7340

**Article ID:** 0253-4177(2007)S0-0552-03

\* Project supported by the State Key Program of National Natural Science of China (No. 50336040) and the Doctorate Foundation of Northwestern Polytechnical University (No. CX200503)

† Corresponding author. Email: zha\_gq@hotmail.com

Received 8 December 2006, revised manuscript received 15 December 2006

©2007 Chinese Institute of Electronics