

Hg_{1-x}Cd_xTe 反型层子能带结构的实验研究*

褚君浩^{1,2} R. Sizmann² F. Koch² J. Ziegler³
and H. Maier³

(1, 中国科学院上海技术物理研究所国家红外物理实验室, 上海)

(2, Physik-Department E-16, T. U. München, 8046 Garching, F. R. G.)

(3, AEG 7100 Heilbronn, F. R. G.)

1989年5月3日收到

本文在 4.2K 下测定了液相外延 HgCdTe MIS 结构样品的电容谱, 磁阻振荡以及迴旋共振效应, 并从实验测量结果, 采用物理参数拟合法, 确定了该样品在电量子限条件下反型层电子能带结构, 包括基态子能带能量 E_0 、费密能级 E_F , 子能带电子有效质量 $m^*(E_F)$ 、 $m^*(E_0)$ 、反型层平均厚度 Z_i 、耗尽层厚度 Z_d , 以及它们随子能带电子浓度 N_s 的变化。

主题词 二维电子气, 子能带, Hg_{1-x}Cd_xTe, 表面界面

一、引言

关于窄禁带半导体界面和表面子能带结构已经有一系列理论计算工作^[1-4], 常用的自洽计算方法强烈地依赖于边界条件的选取而与实验结果不能很好的一致^[4]。因而除理论研究之外, 需要建立一种方法直接从样品的实验测量结果给出样品子能带结构的主要特征。本文在 4.2K 下对组分 $x = 0.234$ 的 Hg_{1-x}Cd_xTe MIS 结构样品测量了电容谱(CV), 表面磁阻振荡(SdH) 以及表面迴旋共振谱(CR)。从这些实验结果采用物理参数拟合法在电量子限条件下确定了子能带结构的主要特征及其对反型层电子浓度 N_s 的依赖关系。

确定子能带结构通常采用一维泊松方程与薛定格方程联立求解的方法。由于泊松方程中电荷密度包括子能带电子波函数分布, 它需要通过求解薛定格方程得到; 而薛定格方程中又包括了表面势函数, 它需要通过求解泊松方程而得; 因而需要循环自洽求解以得到子能带能量和波函数分布的结果。为了代替薛定格方程的严格求解, 我们引进一个描述波函数分布的特征参数 l , 再假定基态子能带能量 E_0 可以按 N_s 展开成级数, 从而引进一次项系数 E_{01} 和二次项系数 E_{02} , 采用这些参数(取代薛定格方程)与泊松方程联立, 计算 MIS 结构体系的电容, 和子能带电子的有效质量, 以拟合实际测量到的 $C-V$ 曲线, 以及从迴旋共振实验得到的有效质量实验值。作上述拟合计算时也需要与由表面磁阻振荡实验给出的 N_s 对偏压 V_s 的关系保持一致。这样就得到和 N_s 有关的子能带结构的详细特征, 包括基态子能带能量 E_0 , 费米能级 E_F , 子能带电子有效质量 m^* , 反型层平均厚度

* 国家自然科学基金部分资助项目。

Z_i , 耗尽层厚度 Z_d , 以及它们与反型层电子浓度 N_s 的依赖关系。

本项研究得到了 $x = 0.234$, $N_a = 4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ P 型 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 的子能带结构, 由于这方法可以适用于不同 x 值, 不同掺杂浓度 N_s , 因此也给出了一种从实验结果估算 p-HgCdTe 反型层子能带结构的方法。

二、物理参数拟合方法

本文用物理参数拟合方法研究 P 型窄禁带半导体 MIS 结构 n 型反型层电子在电量子限条件下子能带结构、及其随表面电子浓度 N_s 的变化。此时, 只有基态子能带被电子占据, 可以更清晰地研究子能带诸物理量的特征。

图 1 表示 p-HgCdTe MIS 结构样品在反型时表面能带弯曲情况。图中 $V(z) = -\varphi(z)$ 代表表面势的负值, E_0 为基态子能带能量, E_F 为费密能量, $D(E)$ 为子能带电子态密度^[1], Z_i 为反型层平均厚度, Z_d 为耗尽层厚度, Z_{av} 为反型层电子到表面的平均距离, $E_{0,av}$ 为反型层基态子能带电子到导带底的平均能量。对于这一体系可以用一维泊松方程描述电荷分布和表面势的关系。假定基态子能带能量 E_0 可以展开成反型层电子浓度 N_s 的级数, 在电量子限条件下, 展开到二次项已足够描述子能带能量随 N_s 的变化。另外定义一个波函数分布参数 l ; 在计算中采用子能带电子态密度公式^[2]。于是可以写出下列一组方程,

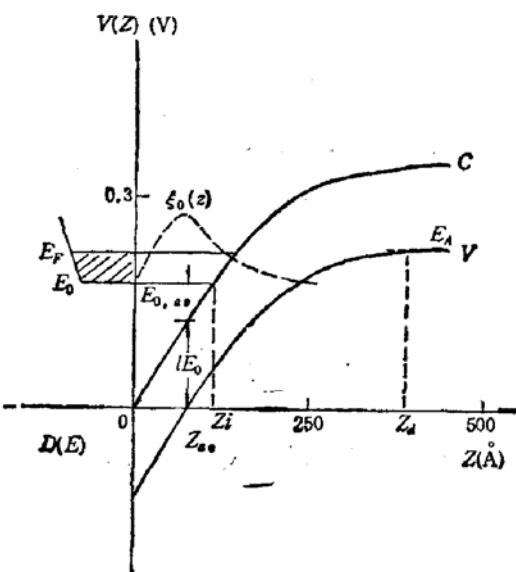


图 1 p-HgCdTe MIS 结构样品反型时表面能带弯曲情况 ($x = 0.234$, $N_a = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $N_s = 3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $T = 4.2 \text{ K}$)

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon\epsilon_0} \quad (1)$$

$$E_0 = E_{00} + E_{01}N_s + N_{02}N_s^2 \quad (2)$$

$$l = \frac{Z_{av}}{Z_i} = \frac{E_0 - E_{0,av}}{E_0} \quad (3)$$

$$N_s = \int_{E_0}^{E_F} \frac{m^*(E)}{\pi\hbar^2} dE \quad (4)$$

$$e\phi_s = E_F + (E_F - E_A) \quad (5)$$

其中

$$\rho(z) = \rho_s(z) + \rho_{dep}(z) \quad (6)$$

$$\rho_{dep}(z) = \begin{cases} -eN_a & (0 < z \leq Z_d) \\ 0 & (Z_d < z) \end{cases} \quad (7)$$

$$\rho_i(z) = -e \sum_n N_i^{(n)} \xi_n^2(z) \quad (8)$$

$N_i^{(n)}$ 是第 n 子能带中电子浓度。

式(2)与式(3)中有关参数由拟合实验结果确定,其中 E_{01} 与 E_{02} 都为小量,分析表明式(2)展开成二次式,在 $N_i \leq 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时已足够描述子能带 E_i 与 N_i 的关系。式(2)与式(3)在一定程度上代替了薛定格方程。 $\xi_n(z)$ 为第 n 个子能带电子波函数的包络函数,可以采用一般形式下的 Fan-Howard 波函数^[6],对于基态子能带 $n = 0$,有

$$\xi_0(z) = \left(\frac{1}{2} b^3\right)^{1/2} Z e^{-bz/2} \quad (9)$$

在本文所涉及的内容里,重要的是波函数的分布参数 l ,它将由拟合实验结果而得。从微观角度而言,如果波函数形式由(9)式确定,从而可以从分布参数 l 求得波函数表达式中的参数 b 。 $m^*(E)$ 是子能带能量 E 处的电子有效质量,由于子能带可以看作为 K_z 方向能量量子化后的能带,因而 $m^*(E)$ 仍可以从 Kane 的非抛物带模型计算而得。式(5)假定了在 4.2K 下,费密能级固连于受主能级,从而总的能带弯曲量 $e\phi_i$ 为费密能量与 $E_s - E_A$ 之和。

在以上方程中包含了一些物理参数,因而需要用这组方程计算几个可以与实验结果比较的物理量,然后由实验结果制约这些参数值。这里我们采用 4 个实测物理量: MIS 结构的电容,表面电导反型阈值电压 V_t ,由迴旋共振实验给出的费密能级处的子能带电子有效质量,以及由表面磁阻振荡实验给出的反型层电子浓度 N_i 对偏压 V_s 的关系。于是我们根据式(1)–(5),采用下列这组公式:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_i = e \left(\frac{\partial N_i}{\partial \phi_i} + N_i \frac{\partial Z_d}{\partial \phi_i} \right), \\ C = \frac{C_i C_s}{C_i + C_s}, \end{array} \right. \quad (10a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_i = \frac{C_i}{e} (V_s - V_t) - N_a Z_d \\ m^*(E) = m_0^* \left[1 + \frac{2(E - lE_0)}{E_s} \right], \end{array} \right. \quad (11)$$

$$(12)$$

来计算电容谱、有效质量以及 N_i 对 V_s 的关系,以期与实验结果获得最佳符合,以确定方程式(2)、(3)中的有关参数,从而确定子能带结构。式(12)在计算有效质量时,考虑了波函数分布引起的修正。如果把电子平均地看作位于距表面 Z_d 处,该处电子能量为 E ,而导带底能量为 lE_0 ,因而子能带电子到导带底的平均能量将为 $E - lE_0$ 。式(10)中 C_i 为半导体反型层电容, C_s 为绝缘层电容, C 为 MIS 体系的电容。在以上表达式中,式(10)计算结果与 $C-V$ 实验曲线拟合。拟合时式(11)计算结果须与 SdH 实验结果所得出的 N_i 对 V_s 的关系符合,式(12)计算结果与 CR 实验所得到的有效质量结果一致。

此外,式(2)所涉及的能量参数中, E_{00} 为子能带阈值能量,即子能带刚开始填充电子时的能量,可由下式得到:

$$E_{00} = \frac{C_i^2 (V_t - V_{fb})^2}{2\epsilon\epsilon_0 e N_a} - (E_s - E_A), \quad (13)$$

其中 V_{fb} 为平带电压, V_i 由实测的表面电导反型阈值电压给出, 也可从 $C-V$ 曲线陡削上升部分读出。同时由于 $C-V$ 曲线耗尽区平直部分的斜率所表示的直线过 (V_{fb}, C_i) 点, 因而 V_{fb} 与 C_i 只有一个待定参数。于是在拟合计算中 l , $E_{01}(E_{02})$ 和 V_{fb} 为三个调节参数, 计算要求符合 CR, SdH 实验结果并拟合 $C-V$ 曲线, 拟合结果是唯一的。上述模型中所涉及的量将可以由实验唯一地确定, 就可以得到 N_i 依赖的描述子能带结构的各种物理量。

下面对电容的拟合计算略作具体说明。从式(10)可知, 计算体系的电容, 需要计算表面层电子浓度 N_i 随表面势 ϕ_i 的变化 $\frac{\partial N_i}{\partial \phi_i}$, 以及耗尽层厚度随表面势的变化 $\frac{\partial Z_d}{\partial \phi_i}$ 。前者可以从式(4)和式(5)解得, 为:

$$\frac{\partial N_i}{\partial \phi_i} = \frac{e[1 + 2(E_F - lE_0)/E_\epsilon]}{\frac{\pi \hbar^2}{m_0^*} + (E_{01} + 2E_{02}N_i) \cdot [1 + 2(E_0 - 2lE_0 + lE_F)/E_\epsilon]}, \quad (14)$$

$$E_F = \frac{-(E_\epsilon - 2lE_0)}{2} + \sqrt{\frac{(E_\epsilon - 2lE_0)^2}{4} + E_0(E_\epsilon + E_0 - 2lE_0) + \frac{E_\epsilon \cdot \pi \hbar^2}{m_0^*} \cdot N_i}; \quad (15)$$

后者需从泊松方程得到。式(1)解为^[7]

$$\varphi(z) = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} \left[N_{dep} \left(z - \frac{Z^2}{2Z_d} \right) + \sum N_i \left(z - \int_0^z (z - z') \xi_n^2(z') dz' \right) \right] \quad (16)$$

如果 Z 足够大,

$$Z_i = \int_0^z Z' \xi_n^2(z') dz'. \quad (17)$$

Z_i 为反型层厚度, 电子主要分布在 $0 < z < Z_i$ 范围, 于是在 $Z \geq Z_i$ 时,

$$V(z) = \frac{e}{2\epsilon \epsilon_0} [N_a Z(2Z_d - Z) + N_i Z_i] \quad (18)$$

式(18)给出了表面势及基态子能带能量, 为:

$$\phi_i = \frac{e}{2\epsilon \epsilon_0} (N_a Z_d^2 + N_i Z_i), \quad (19)$$

$$E_a = \frac{e^2}{2\epsilon \epsilon_0} [N_a Z_i (2Z_d - Z_i) + N_i Z_i]. \quad (20)$$

从此可以导得 $\frac{\partial Z_d}{\partial \phi_i}$.

在计算中受主浓度 N_a 由 $C-V$ 曲线耗尽区部分的斜率 $|K|$ 确定^[8],

$$N_a = \frac{C_i^3}{\epsilon \epsilon_0 e A^2 |K|} \quad (21)$$

A 为电容面积。禁带宽度由公式

$$E_\epsilon(\text{eV}) = -0.295 + 1.87x - 0.28x^2 + (6 - 14x + 3x^2) \times 10^{-4}T \quad (22)$$

给出^[9]。受主电离能采用 Scott 公式^[10]

$$E_A(\text{eV}) = E_0 - \alpha P_0^{1/3} \quad (23)$$

P_0 为 77K 时样品空穴浓度, 参数 $E_0 = 0.0165\text{eV}$, $\alpha = 2.4 \times 10^{-8}\text{cm} \cdot \text{eV}^{1/3}$ 。具体拟合计算结果由下一节给出。

三、实验结果及子能带结构

实验结果是定量确定子能带结构的基础，因而需要进行精确的实验。本文对 LPE HgCdTe MIS 结构样品在 4.2K 下测量了电容谱，表面电导，表面磁阻振荡和表面迴旋共振。

进行电容谱测量的样品，表面经抛光、腐蚀后，用阳极氧化方法生成一层厚约 90nm 的阳极氧化膜，然后蒸上约 $\sim 1\mu\text{m}$ 厚的 ZnS 钝化膜，再涂上约 $1\mu\text{m}$ 厚的腊壳，然后在表面蒸上金属栅，制成一个可供测电容的 MIS 结构样品。由于所测得的 $C-V$ 曲线是拟合计算的数据之一，因而高精度测量 $C-V$ 曲线是颇为重要的。本文采用差分法电容测量方法，精度可达 0.01pF/V ，差分法测量电容的原理已在另文中

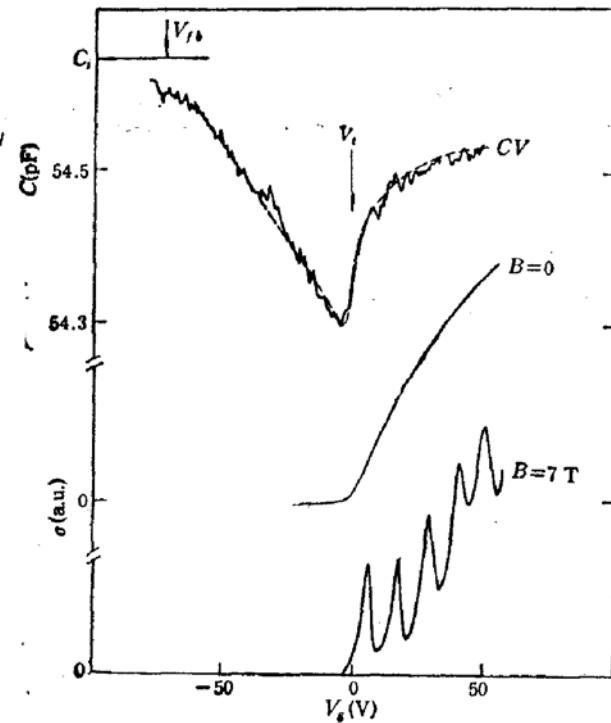


图 2 p-HgCdTe 的电容谱，表面电导和表面磁阻振荡 ($x = 0.234$, $N_s = 4.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $T = 4.2\text{K}$)

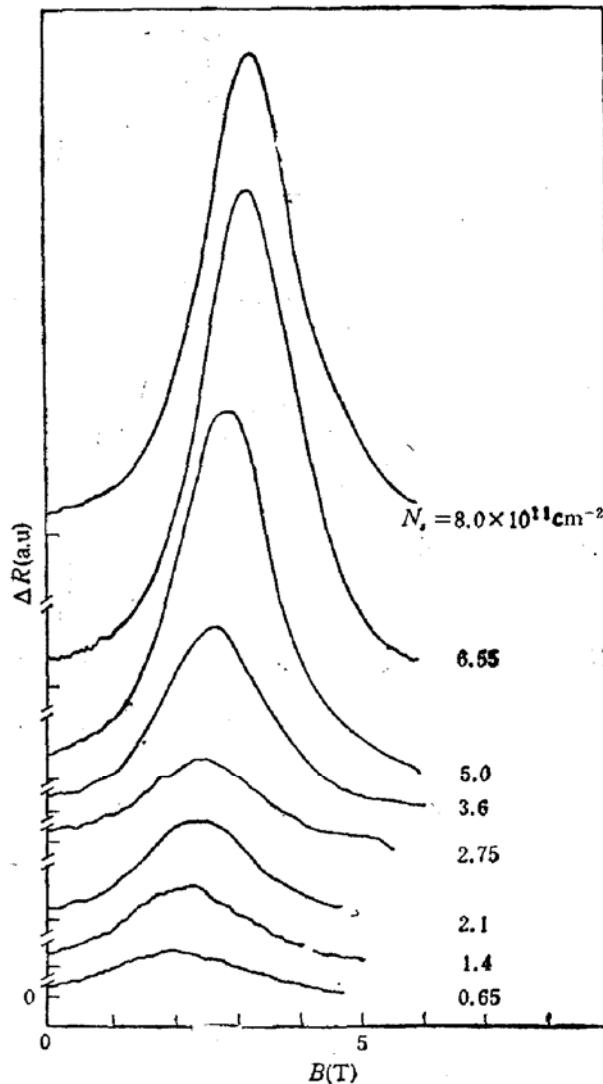


图 3 p-Hg_{1-x}CdTe ($x = 0.234$, $N_s^* = 4.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$) 样品在不同表面电子浓度下的迴旋共振 ($\hbar\omega = 12.7\text{meV}$, $T = 4.2\text{K}$)

加以说明^[12]。所测得的曲线由图 2 上部曲线所表示。

测量 $C-V$ 曲线以后，再测量同一样品的表面电导和磁阻振荡。样品的栅极采用半透明 Ni-Cr 薄膜，在上面再蒸上同心环电极。同心环电极间施加频率约为 $\sim 10^7\text{MHz}$ 的高频信号，高频电流在样品表面通过。同时加上低频斩波偏压，用锁相技术测量表面电导。如果再加上垂直于样品表面的磁场，就可以测量反型层的 SdH 振荡效应。所测样品的表面电导以及 $B = 7\text{T}$ 下的 SdH 振荡曲线在图 2 的中部和下部给出。表面电导曲线给出

了反型阈值电压 V_t , 这时电子开始填充子能带。表面磁阻振荡的峰值, 表示费密能级通过某个朗道能级, 每个峰值相应于一个朗道能级, 其电子浓度为 $2.418 \times 10^{10} B (\text{cm}^{-2})^{[1]}$, 于是 SdH 实验结果给出了反型层电子浓度 N_s 与偏压 V_s 的关系。

测量 SdH 振荡时, 略为修改一下实验系统就可以同时研究该样品的迴旋共振。在垂直于样品表面, 平行于磁场方向照射远红外激光, 测量样品表面在平带电压 V_{fb} 与所加偏压 V_s 时反射率之差 ΔR , 扫描磁场, 则可测得迴旋共振信号。所用激光为爱丁堡公司的 295 型光泵远红外激光器。图 3 为该样品在不同表面电子浓度 N_s 时的迴旋共振曲线。光子能量为 $\hbar\omega_c = 12.7 \text{ meV}$, 从曲线簇可以看到迴旋共振峰, 以及共振峰随不同 N_s 的移动, 这说明了有效质量随 N_s (或 E_F) 的变化。从共振峰磁场位置可以计算费密能级处于能带电子的有效质量, 得到 $m^*(E_F)$ 随表面电子浓度 N_s 变化的实验结果。

采用上节所提出的物理参数拟合计算模型, 对 $x = 0.234$, $N_s = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 的 p- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ MIS 结构的电容电压曲线的拟合计算结果由图 2 中上方的虚线表示。表 1 为该样品的拟合参数及有关物理量:

表 1 样品的有关参数

C_s (PF)	V_{fb} (V)	V_s (V)	t	E_{00} (eV)	E_{01} (eV · cm ²)	E_{02} (eV · cm ⁴)	N_s (cm ⁻³)	E_s (eV)	E_A (eV)
54.65	-75	0	0.81	0.146	1.2×10^{-13}	-5×10^{-16}	4×10^{17}	0.128	0

图 4 表示 N_s 对偏压 V_s 的关系, 由 CV 拟合计算所得结果由“0”表示, 而从 SdH 振荡所

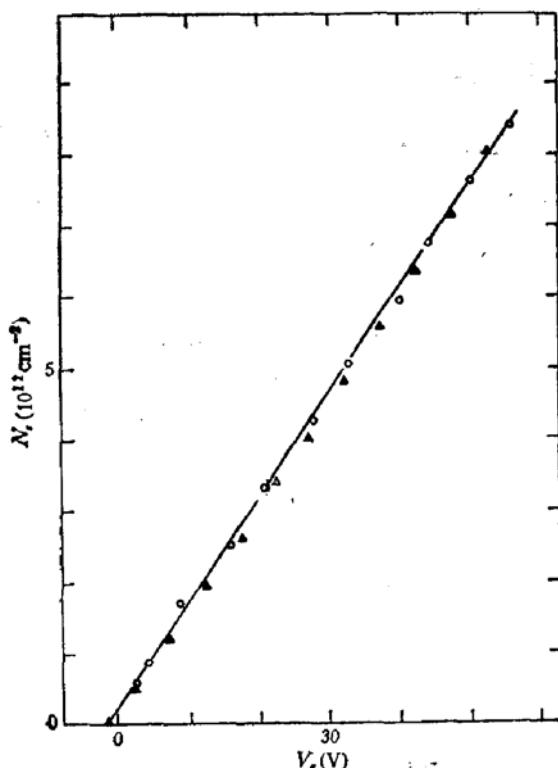


图 4 表面电子浓度 N_s 对偏压 V_s 的关系。
p- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.234$, $N_s - N_d = 4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $T = 4.2 \text{ K}$)

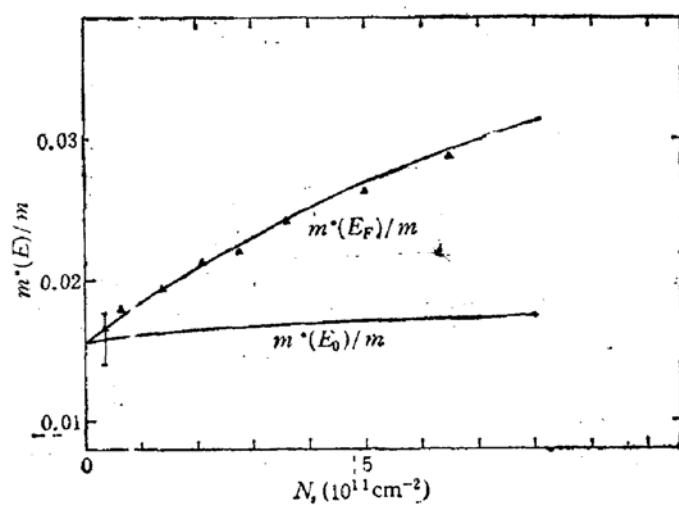


图 5 子能带电子有效质量对表面电子浓度的关系。曲线为
 CV 拟合计算结果, 三角点为 CR 实验结果。p- $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$
($x = 0.234$, $N_s - N_d = 4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $T = 4.2 \text{ K}$)

得结果由“▲”表示。两者的一致表示随偏压的增加，子能带充填电子，既贡献于表面电容，又贡献于表面电导的振荡，在数量上自洽。从 CV 拟合计算所得到的有效质量与 N_s 的关系由图 5 中曲线所示，从 CR 实验直接测得的费米能级处的子能带电子有效质量与 N_s 的关系，为图 5 中三角点“▲”所表示，符合颇为一致。由此可知，根据本文所提模型进行的拟合计算，同时符合了 CV , SdH 振荡，以及 CR 实验结果，从而提供了给定 HgCdTe MIS 结构反型层子能带结构的可靠参数。这一模型计算时把实验结果作为输入，而输出的是子能带结构。

对 $x = 0.234$, $N_a = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品，在 $N_s = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时，表面能带弯曲情况及子能带结构，已在图 1 中定量表示。基态子能带能量 E_0 ，费密能级 E_F 以及反型层平均厚度 Z_i ，耗尽层厚度 Z_d 对 N_s 的关系分别在图 6 和图 7 中给出。从图可见，随着 N_s 从 0 增加到 $7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ， E_0 从 0.146 eV 增加到 0.206 eV， E_F 从 0.146 eV 增加到 0.276 eV；反型层厚度从 112 Å 减为 107 Å，或者说几乎不变，耗尽层厚度从 355 Å 增加到 410 Å。

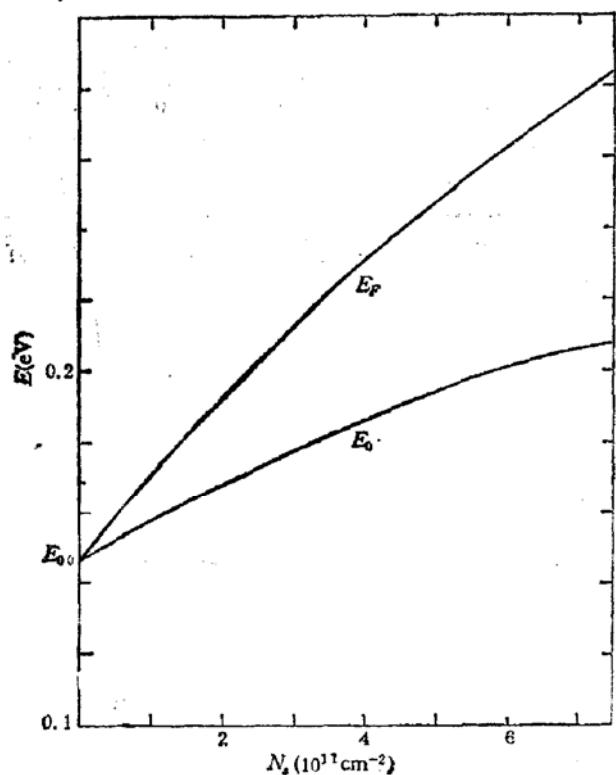


图 6 p-Hg_{1-x}Cd_xTe ($x = 0.234$) 基态子能带能量 E_0 ，费密能级 E_F 随反型层电子浓度 N_s 的变化关系。 $(N_a - N_d = 4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}, T = 4.2 \text{ K})$

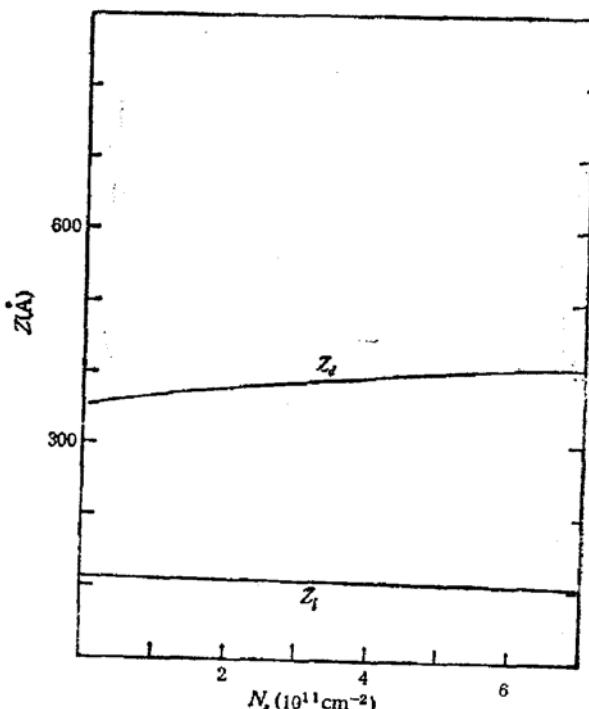


图 7 p-Hg_{1-x}Cd_xTe ($x = 0.234$) 反型层平均厚度 Z_i 和耗尽层厚度 Z_d 对表面电子浓度 N_s 的关系。 $(N_a^* = 4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3})$

四、讨 论

本文所采用的物理参数拟合方法原则上适用于确定任何 P 型半导体具有不同异质结构的反型层电子子能带结构。对于 p-HgCdTe，本文报道了受主浓度 $N_a = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ，组分 $x = 0.234$ 样品的实验和分析结果，实际上该方法同样适用于 N_s 值低的样

品, 和不同 x 值的样品, 以及用不同界质层构成的 MIS 结构样品。由于电容谱, 表面磁阻振荡谱, 以及迴旋共振谱是子能带结构的直接反映, 因而用这一方法所确定的子能带结构比其它方法更符合被测样品的实际。

由此可见, 采用物理参数拟合计算模型可以从实验测量结果直接给出依赖于表面电子浓度 N_s 的子能带结构。这对于进一步研究电致自旋分裂子能带的色散关系、朗道能级、以及子能带共振, 回旋共振, 自旋共振, 及其跃迁规律都具有重要意义。用这一方法所得子能带结构的计算结果, 已用于定量计算朗道能级, 并成功地分析了实验测量到的 $HgCdTe$ 表面反型层电致自旋分裂子能带电子的自旋共振^[13]。

致谢: 本文实验工作在西德慕尼黑技术大学物理系完成, 作者之一(褚君浩)感谢洪堡基金会给予的资助。作者曾和汤定元教授及 U. Rössler 教授进行过有益的讨论, 沈学础教授审阅了全文, 作者深表谢意。

参 考 文 献

- [1] F. J. Ohkawa and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **33**, 1325(1974).
- [2] Y. Taksda, K. Arai, N. Uchimura and Y. Umura, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **49**, 1851(1980).
- [3] G. E. Marques and L. J. Sham, *Surface Sci.*, **113**, 131(1982).
- [4] F. Malcher, I. Nachev, A. Ziegler and U. Rössler, *Z. Phys. B-Condensed Matter*, **68**, 437(1987).
- [5] J. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.*, **54**, 437(1982).
- [6] F. F. Fang and W. E. Howard, *Phys. Rev. Lett.*, **16**, 97(1966).
- [7] F. Koch, in "Narrow Gap Semiconductors" ed. by W. Zawadzki, Springer-Verlag (1980) 511.
- [8] J. P. Rosbeck and M. E. Harper, *J. Appl. Phys.*, **62**, 717(1987).
- [9] J. Chu, S. Xu and D. Tang, *Appl. Phys. Lett.*, **43**, 046(1983).
- [10] W. Scott, *J. Appl. Phys.*, **47**, 1408(1976).
- [11] 袁皓心、童斐明、汤定元, 红外研究, **6**, 3(1987).
- [12] 褚君浩, R. Sizmann, R. Wollrab, F. Koch, J. Ziegler and H. Maier, 红外研究, **8**, 327(1989).
- [13] R. Sizmann, Junhao Chu, F. Koch, J. Ziegler and H. Maier, 19th International Conference on Physics of Semiconductors, Warsaw, Poland, Sept. p. 471(1988).

Experimental Study of Inversion Layer Subband Structure on HgCdTe

Junhao Chu^{1,2}, R. Sizmann², F. Koch², J. Ziegler³ and H. Maier³

(¹ National Laboratory for Infrared Physics Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

(² Physik-Department E-16 T. U. München, D-8046 Garching, FRG)

(³ AEG, D-7100 Heilbronn, FRG)

Abstract

The measurements of capacitance spectroscopy, magnetotransport oscillation and cyclotron resonance for LPE HgCdTe MIS structure samples are performed at temperature of 4.2 K, and the inversion layer electron concentration N_s , dependent subband structures including subband energy E_0 , Fermi energy E_f , effective mass M^* , average depth of inversion layer Z_0 and depletion layer depth Z_d in the electric quantum limit are determined quantitatively from the experimental measurements by using the physical parameter fitting method (PPFM).

Key words 2 DEG, Subband, HgCdTe, Surface and Interface