

Hg_{1-x}Cd_xTe 探测器表面 积累层的磁输运特性

桂永胜 郑国珍 褚君浩 郭少令 汤定元

(上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室 上海 200083)

蔡 穗

(昆明物理研究所 昆明 650223)

摘要 利用 WKB 近似对 Hg_{1-x}Cd_xTe 探测器表面积累层二维电子气的色散关系进行了计算, 获得了不同表面电子浓度下, 各子带的电子浓度、能级位置和有效质量。考虑了能带的非抛物性, 由 SdH 振荡获得的结果与理论符合的很好。

PACC: 7215G, 7320, 7280E

1 引言

I - VI 化合物半导体 Hg_{1-x}Cd_xTe 是当今最重要的红外探测器材料, 它被广泛地用于制造高性能的 3~5μm 和 8~14μm 的光导探测器。用于制造光导探测器的体材料往往要对表面进行钝化处理, 这些复杂的化学过程将在表面引入一个势阱和大量活性的缺陷态^[1], Hg_{1-x}Cd_xTe 材料本身的不稳定^[2]也会使暴露在空气中的表面被氧化, 引起能带的弯曲, 在材料表面处形成电子积累层或反型层。Hg_{1-x}Cd_xTe 光导探测器表面的电子浓度在 10¹¹~10¹²cm⁻²量级, 由此引起的表面势往往要比材料的带隙还大。另外, 光导探测器厚度的典型值为 10μm, 77K 时的载流子浓度为 10¹⁴~10¹⁵cm⁻³, 由器件表面提供的载流子数目将与体内的相当, 甚至超过体内的载流子数目, 所以表面对器件性能的影响是相当大的。

Nemirovsky 和 Kidron^[3]采用霍耳效应和电容-电压测量获得了 Hg_{1-x}Cd_xTe 积累层的电子浓度和迁移率, Nicholas^[4]等测量了积累层的 SdH 振荡, 指明 Hg_{1-x}Cd_xTe 表面重积累层可以用具有多个子带的二维电子气来描述。理论上计算这些子带的色散关系, 需要利用表面势与表面电子浓度的自洽来完成。I. Nachev^[5]和 J. R. Lowney^[6]采用八带模型分别对 Hg_{1-x}Cd_xTe 表面反型层和积累层中各子带电子的色散关系进行了理论计算, 该模型的计算量很大。Ando^[7]利用半经典近似对窄带半导体表面积累层中的子带中的电子行为进行了研究,

桂永胜 男, 博士研究生, 目前从事于半导体材料和器件的磁输运特性研究

郑国珍 女, 研究员, 目前从事于半导体材料和器件的磁输运特性研究

1996 年 7 月 6 日收到初稿, 1996 年 12 月 16 日收到修改稿

其方法较为简单.

本文首先根据 WKB 近似, 计算了积累层中各子带的电子浓度、有效质量和能级; 并给出了光导探测器材料的 SdH 振荡实验结果, 通过对 SdH 振荡曲线进行 Fourier 变换, 得到了不同子带的电子浓度; 同时采用“迁移率谱”的方法获得了表面电子的浓度和迁移率.

2 理论模型

窄禁带半导体材料的导带是非抛物型的, 近似满足下面的关系:

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} = E_K \left(1 + \frac{E_K}{E_g}\right) \quad (1)$$

式中 $K = (k_x, k_y, k_z)$ 是三维波矢; E_K 为波矢为 K 时的电子能量; E_g 和 m^* 分别是材料的带隙和导带底的有效质量.

$Hg_{1-x}Cd_xTe$ 器件表面重积累层的电势分布满足 Poisson 方程

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_s \epsilon_0} = \frac{qn(z)}{\epsilon_s \epsilon_0} \quad (2)$$

式中 ϵ_s 为低频介电常数; $n(z)$ 为电子浓度的分布函数, 它主要是电离的表面活性杂质态. 体材料中电离杂质以及体与表面介电常数不同引起的镜像力对电势均有影响, 相对表面电子而言, 它们的影响较小, 在方程(2)中可以忽略它们的影响.

1. 2K 下, 按经典近似, 并考虑自旋简并, 电子浓度可写为:

$$n(z) = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} K_F(z)^3 \quad (3)$$

Fermi 波矢 K_F 与位置 z 有如下关系:

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} = [E_F - qV(z)] \left[1 + \frac{E_F - qV(z)}{E_g}\right] \quad (4)$$

式中 $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. 在 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限条件下, 量子力学规律就转化为经典力学规律. WKB 近似^[8,9]的实质在于引入一个按 \hbar 的级数展开并略去高于 \hbar^2 级的项, 于是我们可以把薛定谔方程用它的经典极限来代替. 由于这种方法能在经典解释没有意义的空间区域中实现(比如 $E < V$ 的区域), 所以, 它具有比经典近似本身更广的适用范围. 将 WKB 近似用于求解 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 表面积累层势阱中的能级, 则表面积累层第 n 子带能量 $E_n(k)$ 和垂直于表面的波矢 k_z 满足:

$$\int_0^{z_n} k_z dz = (n + \frac{3}{4})\pi \quad (5)$$

其中 z_n 定义为 $k_z[z_n, k, E_n(k)] = 0$ 时的转折点. (5) 式与波尔-索末菲量子规律的不同仅在于分数量子数代替了整数量子数.

由(1)~(5)式可得:

$$\int_{\varphi^*(k)}^{E_F} \frac{d\varphi}{[\alpha F(\varphi, E_g)]^{1/2}} \left\{ \beta [\varphi - E_F + E_n(k)] \left[1 + \frac{\varphi - E_F + E_n(k)}{E_g}\right] - k^2 \right\}^{1/2} = (n + \frac{3}{4})\pi \quad (6)$$

其中:

$$\alpha = \frac{2q(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \epsilon_s \epsilon_0 \hbar^3} \quad (7)$$

$$\beta = \frac{2m^*}{\hbar^2} \quad (8)$$

$$\varphi = E_F - qV(z) \quad (9)$$

$$[\varphi^* - E_F + E_n(k)][1 + \frac{\varphi^* - E_F + E_n(k)}{E_g}] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (10)$$

$$F(\varphi, E_g) = \int_0^\varphi d\xi [\zeta(1 + \zeta/E_g)]^{3/2} \quad (11)$$

在(6)式中,令 $k=k_{Fn}$ 和 $E_n(k)=E_F$,即可获得第 n 子带的 Fermi 波矢 k_{Fn} ,并由此可得 n 子带的电子浓度 $N_{sn}=k_{Fn}^2/\pi$, N_{sn} 的总和就是 N_s . 一般情况下由于表面处的电子浓度 N_s^0 与 N_s 相差不大. N_s^0 可以用表面电势分布计算,

$$N_s^0 = \frac{\epsilon_s \epsilon_0}{q} \frac{dV(z)}{dz} |_{z=0} = \frac{\epsilon_s \epsilon_0}{q} [\alpha F(E_F, E_g)]^{1/2} \quad (12)$$

第 n 子带的有效质量 m_n^* 定义为:

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{m^*}{\hbar^2 k} \frac{\partial E_n(k)}{\partial k} \quad (13)$$

可以通过求解方程(6)获得.

3 理论计算

用于制造 $8\sim 14\mu\text{m}$ 波段长波光导探测器的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料 x 一般为 0.2 左右, 利用褚君浩等人^[10,11]的 CXT 公式, 可得 $T=1.2\text{K}$ 时, $E_g=93.45\text{meV}$, $m_e^*=8.02\times 10^{-3}m_0$, 另外低频介电常数 ϵ_s 取值为 17.6 ^[12].

图 1 描述了 $T=1.2\text{K}$ 时, $n\text{-Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 探测器不同子带底能量 $E_n(k=0)$ 与 N_s 的关系. Fermi 能级 E_F 钉扎在施主能级上,一般认为 $x=0.2$ 附近的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料浅施主能级位于导带底以上 5meV 左右, 在这里的计算中假定它与体内导带底重合. 从图中可以看出 E_n 与随着 N_s 的增加而增加.

图 2 为组分 $x=0.214$ 和 $x=0.191$ 的长波光导探测器表面重积累层中, 不同子带的电子浓度 N_{sn} 以及表面处电子浓度 N_s^0 与 N_s 的关系. 经典的近似认为表面处的电子浓度最大, 而量子理论^[13]的结果是表面处的电子浓度会有显著减小, 图中很明显的可以看出 N_s 要比 N_s^0 稍大($\sim 20\%$), 这就表明, 虽然在理论计算中采用了半经典近似, 但计算的结果还是符合实际情况的. 对 $x=0.191\sim 0.214$ 之间不同组分的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 探测器重积累层的计算表明, N_{sn} 与 N_s 呈很好的线性关系, 而且这种线性关系几乎与组分 x 无关, 对基态到第 4 激发态, 斜率分别为 $0.668, 0.219, 0.077, 0.027, 0.009$; J. R. Lowney 等人^[6]采用八带模型对 $x=0.191$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 探测器重积累层进行了计算, 对 $n=0\sim 3$, 斜率分别为 $0.673, 0.223,$

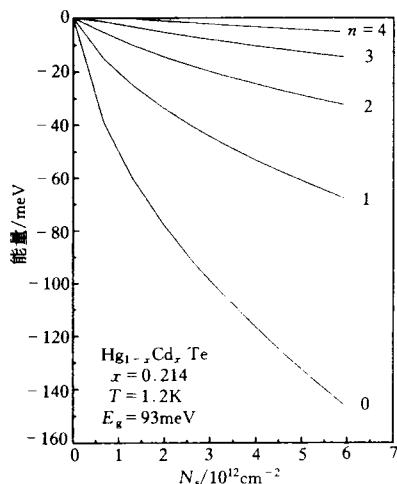


图 1 理论计算所得的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 探测器表面子带底能量 E_n 与 N_s 的关系

0.077、0.027, J. Singleton 等人^[14]对大量实验结果的分析,也得出类似结果,禁带宽度在 30~90meV 之间的 n-Hg_{1-x}Cd_xTe, 对 $n=0\sim 4$, 积累层中 N_{sn} 对 N_s 的斜率分别为 0.6452、0.2158、0.097、0.032、0.010。这表明对 n-Hg_{1-x}Cd_xTe 积累层, 只要得到任一子带的载流子浓度, 就可以推算总的载流子浓度, 反之, 知道了积累层中总的载流子浓度, 也可以计算出各个子带的载流子浓度。

图 3 为不同子带有效质量与总表面载流子浓度的关系, 有效质量与表面载流子浓度的强烈依赖关系表明了子能带的非抛物性, 这种非抛物性在优化器件结构时必须加以考虑。

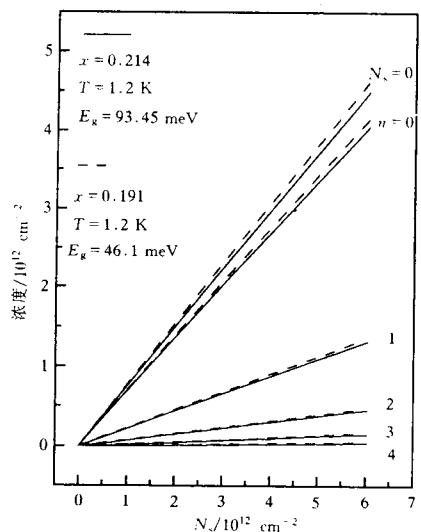


图 2 理论计算所得的不同组分 Hg_{1-x}Cd_xTe 探测器表面各子带电子浓度 N_{sn} 与 N_s 的关系

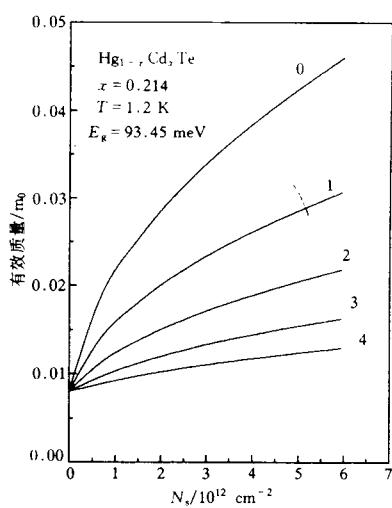


图 3 理论计算所得的不同组分 Hg_{1-x}Cd_xTe 探测器表面各子带底有效质量 m_n^* 与 N_s 的关系

4 实验结果与讨论

样品的尺寸为 $888\times290\times8\mu\text{m}^3$, 霍耳电极间的距离为 $336\mu\text{m}$, 样品的上下表面均进行

阳极氧化钝化处理, 采用 In 接触的扩展电极, 电极与材料之间形成良好的欧姆接触。77K 时, 体材料电子浓度和迁移率分别在 $5.0\times10^{15}\text{cm}^{-3}$ 和 $2.0\times10^5\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 左右。为了准确地测量 SdH 振荡, 我们利用了全自动的程控测试系统, 并使用了高精度的数字电流源和程控数字电压表, 以提高实验的精度。

在 $1.2\sim50\text{K}$ 范围内, 用直流法对不同的样品进行了强磁场输运实验, 样品表面与磁场方向的夹角分别为 $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ 。图 4 为样品 684-1 和 685-5 在 1.2K 时的迁移率谱, 图中峰的位置即为不同种类电子的迁移率, 峰的高度

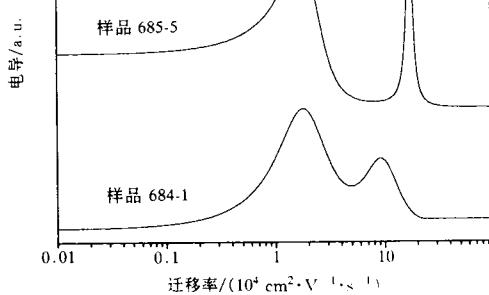


图 4 样品 685-5 和 684-1 的电子迁移率谱

为该类电子提供的电导。从谱中可以看出器件主要由体内电子和表面电子导电,二者对电导的贡献相当。表 1 是从迁移率得到的样品参数。

表 1 样品的基本电学参数

	体内电子		表面电子	
	浓度/ cm^{-3}	迁移率/ $(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	浓度/ cm^{-3}	迁移率/ $(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$
685-5	8.35×10^{14}	1.70×10^5	5.51×10^{15}	1.79×10^4
684-1	1.24×10^{15}	8.71×10^4	5.18×10^{15}	1.75×10^4

从迁移率谱中得到的表面电子浓度是积累层中电子对整个厚度的平均值,实际上表面电子只分布在表面 $0.5\mu\text{m}$ 的范围内,如果认为上下表面的情况完全相同,样品 684-1 和 685-5 的表面电子面密度分别为 $2.07 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ 和 $2.20 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ 。

图 5(a)、(b) 分别为样品 685-5 和 684-1 表面垂直磁场方向时的霍耳电压和磁阻随磁场的变化关系,样品所加的电流为 $2\mu\text{A}$ 。当夹角从 90° 向 0° 变化时,图中的振荡逐步减弱直至完全消失,这说明了这些振荡是由表面积累层引起的,具有二维的特性。当外加磁场垂直于器件积累层时,原来的子带变为一系列的朗道能级,随着磁场强度的增加,朗道能级依次通过费米能级,引起电子态密度的变化,产生了磁阻振荡。磁阻振荡的最低点,将对应 Hall 电压的台阶。每个子带都引起一系列的振荡,振荡的周期与 $1/B$ 有关,并且有 $N_i = 2eB_{fi}/h$ 的关系, B_{fi} 为 i 子带振荡的基频。

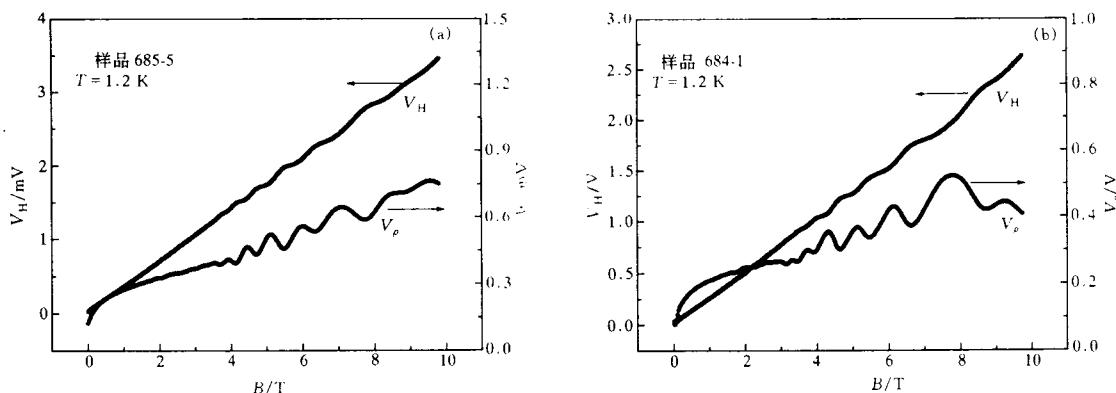


图 5 Hall 电压和磁阻电压与磁场强度的关系

(a) 685-5; (b) 684-1

通过对 SdH 振荡曲线的 Fourier 变换,便可得到不同子带的电子浓度。图 6 为样品 685-5 和 684-1 SdH 振荡的 Fourier 变换,标号 a, b 和 c 表示不同表面或同一表面的不同区域,样品 685-5 和 684-1 中的 0° 峰都很强,说明它所对应区域的表面电子数目较多,表 2 为根据图 6 计算得到的不同子带的表面电子浓度。

表 2 中不同子带之间的电子浓度关系与第三节的理论计算基本符合,在表面电导中起主要作用的 c 区域的电子,其总的电子浓度分别为 2.16 和 $1.91 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$,比从迁移率谱得到的浓度稍低,这是因为其余区域的表面电子数目虽然少,但它们的浓度较高,最后得到的平均表面电子浓度比 c 区域的要高些,与迁移率谱得到的相当。

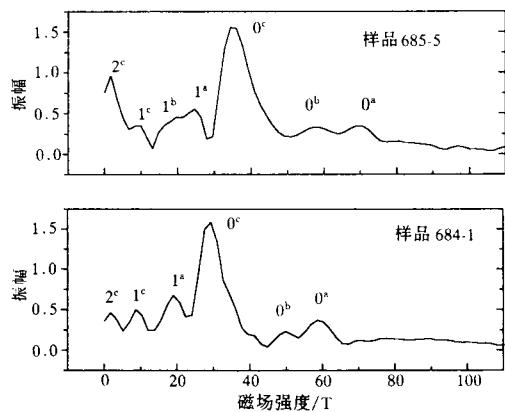


图 6 样品 685-5 和 684-1 的 SdH
振荡数据的 Fourier 变换曲线

表 2 不同子带的表面电子浓度

	685-5			684-1		
	a	b	c	a	b	c
$N_{s0}/\times 10^{12}\text{cm}^{-2}$	3.30	2.75	1.65	2.81	2.40	1.41
$N_{s1}/\times 10^{11}\text{cm}^{-2}$	11.8	9.44	4.72	9.09		4.13
$N_{s2}/\times 10^{10}\text{cm}^{-2}$			7.68			8.26

5 结论

本文采用了 WKB 近似对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 表面积累层的两维电子气子带的电子浓度、能级和有效质量进行了理论计算, 两维系统中能带表现出了很强的非抛物性。子带的电子浓度与总的表面电子浓度几乎成线性关系, 实验结果已证实了这一理论, 这种线性关系基本与组分无关。这些模型提供了探测器表面积累层的一些基本电子态, 这些表面电子态对器件的性能有着重要影响。最后本文提供了一种简单的通过 Fourier 变换 SdH 振荡来确定子带电子浓度的方法。

参 考 文 献

- [1] Y. Nemirovsky and G. Bahir, J. Vac. Sci. Technol., 1991, **A7**: 450.
- [2] G. Nimtz, B. Slicht and R. Dornhaus, Appl. Phys. Lett., 1979, **34**: 410.
- [3] Y. Nemirovsky and I. Kirdron, Solid-State Electron., 1979, **22**: 831.
- [4] R. J. Nicholas, F. Nasir and J. Singleton, J. Cryst. Growth, 1988, **86**: 656.
- [5] I. Nachev, Semicond. Sci. Technol., 1988, **3**: 29.
- [6] J. R. Lowney *et al.*, J. Electron. Mater., 1993, **22**(8): 985.
- [7] Tsuneya Ando, J. Phys. Soc. Jpn., 1985, **54**(7): 2676.
- [8] A. 梅西亚, 苏汝铿, 汤家镛译,《量子力学》第二卷, 1986, 北京: 科技出版社, 236.
- [9] 玻姆, 侯德彭译,《量子理论》, 1982, 北京: 商务印书馆, 319.
- [10] 褚君浩, 等, 科学通讯, 1982, **27**: 403.
- [11] 褚君浩, 等, 红外研究, 1985, **4**: 255.
- [12] R. D. S. Yadava, A. K. Gupta and A. V. R. Warrier, J. Electron. Mater., 1994, **23**(12): 1359.
- [13] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, Rev. Mod. Phys. 1982, **54**: 437.
- [14] J. Singleton, F. Nasir and R. J. Nicholas, SPIE, 1986, **659**: 99.

Magneto-Transport Properties for Accumulated Layer on Surface of $Hg_{1-x}Cd_xTe$ Detector

Gui Yongsheng, Zheng Guozhen, Chu Junhao, Guo Shaoling and Tang Dingyuan

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)

Cai Yi

(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223)

Received 6 July 1996, revised manuscript received 16 December 1996

Abstract WKB approximation is used for the calculation of subband dispersion relations in accumulated layers on $Hg_{1-x}Cd_xTe$ detector. The concentration of electrons, energy level and effective masses have been computed for each subband for various total electron concentration in accumulation layers. The agreement with Shubnikov-de Hass measurements is very good with the calculation if nonparabolicity is considered.

PACC: 7215G, 7320, 7280E