

# P-型 HgCdTe MIS 结构反型层 激发态子能带结构研究

刘 坤 褚君浩 李 标 汤定元

(中国科学院上海技术物理研究所 红外物理国家重点实验室 上海 200083)

**摘要** 本文在 4.2K 下获得了 P-型 HgCdTe 反型层有两个子能带被占据时的电容谱. 基于多个子带被占据的非量子限情形, 提出了一个实验模型. 用该模型对实验结果进行了拟合, 获得了反型层基态及激发态子能带结构, 包括基态子能带能量、第一激发态子能带能量、费米能级、耗尽层厚度、反型层平均厚度以及它们随反型层电子浓度的变化关系.

**PACC:** 7128, 7340Q

## 1 引言

P-型窄禁带半导体  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  金属-绝缘体-半导体(MIS)结构反型层子能带研究是研制 MIS 阵列红外探测器的理论基础, 因此是一个很有意义的课题<sup>[1]</sup>. 近来, 作者之一研究了量子限条件下 P 型 HgCdTe MIS 结构的电容谱, 提出了一个实验模型, 并由此获得了量子限条件下反型层基态子能带结构的实验结果<sup>[2-4]</sup>. 基于窄带半导体  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的特点, 作者也曾提出一个自洽理论模型并获得了与实验符合较好的理论结果<sup>[5-6]</sup>. 这就为窄禁带半导体  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  反型层子能带结构研究提供了较新好的途径. 本文则进一步研究了非量子限条件下的反型层子能带结构, 给出了一个多子带被占据时的电容谱实验模型. 在 4.2K 下测量了 P-型  $\text{Hg}_{0.787}\text{Cd}_{0.213}\text{Te}$  MIS 结构的电容谱, 获得了有两个子带被占据时的实验结果. 用非量子限条件下的电容谱实验模型对之进行了拟合, 获得了反型层子能带结构, 包括基态子能带能量  $E_0$ 、第一激发态子能带能量  $E_1$ 、费米能级  $E_F$ 、耗尽层厚度  $Z_d$ 、反型层平均厚度  $Z_{av}$  以及它们随反型层电子浓度  $N_s$  的变化关系. 这对于研究反型层子能带带间光跃迁具有十分重要的意义.

## 2 实验模型

图1表示P-型HgCdTeMIS结构在反型时有两个子带被占据时能带弯曲情况.  $E(z)$ 代

刘 坤 男, 1967 年生, 助理研究员, 博士, 从事窄禁带半导体光电性质的研究

褚君浩 男, 1945 年生, 研究员, 从事半导体物理研究

1994 年 2 月 25 日收到初稿, 1994 年 4 月 22 日收到修改稿

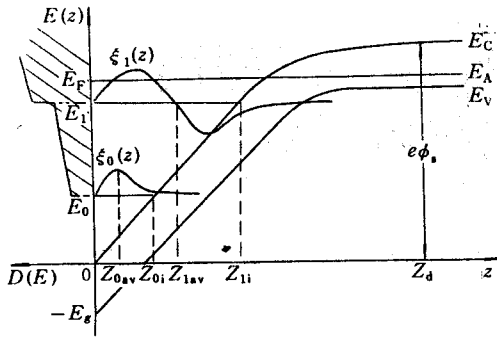


图 1 P-HgCdTe MIS 结构  
反型时的能带弯曲示意图

表距表面  $z$  处的能带弯曲,  $e\Phi_s$  为表面能带总弯曲量;  $D(E)$  为子能带电子态密度;  $E_g$  是禁带宽度,  $E_0$  是基态子能带能量,  $E_1$  是第一激发态子能带能量,  $E_F$  为费米能级,  $E_C$  为导带底,  $E_V$  为价带顶,  $E_A$  为受主电离能.  $Z_{0av}$ 、 $Z_{1av}$  分别代表两个带电子平均分布位置,  $Z_{0i}$ 、 $Z_{1i}$  为两子带对应的反型层厚度,  $Z_d$  为耗尽层厚度.  $\xi_0(z)$ 、 $\xi_1(z)$  分别为两子带电子波函数. 引入参数  $j_0(=Z_{0av}/Z_{0i})$ 、 $j_1(=Z_{1av}/Z_{1i})$  来描述两带波函数平均效应, 则  $(E-E_0)$ 、 $j_0$ 、 $(E-E_1)$ 、 $j_1$  是两子带电子到导带底的平均能量. 考虑带间相互作用并根据参考文献[2,7], 反型层子能带电子有效质量  $m_0^*(E)$ 、 $m_1^*(E)$  可分别表示为:

$$m_0^*(E) = \left[1 + \frac{2(E - j_0 E_0)}{E_g}\right] \frac{0.05966 E_g (E_g + 1)}{E_g + 0.667} m_0 \quad (1a)$$

$$m_1^*(E) = \left[1 + \frac{2(E - j_1 E_1)}{E_g}\right] \frac{0.05966 E_g (E_g + 1)}{E_g + 0.667} m_0 \quad (1b)$$

式中  $m_0$  为自由电子质量, 中括号后面项为导带底电子有效质量  $m_b^*$ .

图 1 中反型层子能带体系可用一维泊松方程和薛定谔方程描述, 但考虑到 HgCdTe 反型层子能带电子有效质量小, 态密度较低, 子带中电子间相互作用可忽略; 同时由于  $E_0$ 、 $E_1$  可展开成反型层电子浓度  $N_s$  的级数, 且展开到二次项就已足够描述子能带能量随  $N_s$  的变化, 因此可用下面一组较简单方程描述这个子能带体系:

$$\frac{d^2 \Phi(z)}{dz^2} = - [\rho_{\text{depl}}(z) + \rho_s] / \epsilon_s \epsilon_0 \quad (2)$$

$$E_0 = E_{00} + E_{01} N_s + E_{02} N_s^2 \quad (3a)$$

$$E_1 = E_{10} + E_{11} N_s + E_{12} N_s^2 \quad (3b)$$

$$N_s = N_{s0} + N_{s1} \quad (4a)$$

$$N_{s0} = \int_{E_0}^{E_F} \frac{m_0^*(E)}{\pi \hbar^2} dE \quad (4b)$$

$$N_{s1} = \int_{E_1}^{E_F} \frac{m_1^*(E)}{\pi \hbar^2} dE \quad (4c)$$

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

其中:

$$\rho_{\text{depl}}(z) = 0 \quad (z > Z_d)$$

$$\rho_{\text{depl}}(z) = -eN_{AD} \quad (0 < z < Z_d)$$

$$\rho_s = -eN_s/Z_{av} \quad (0 < z < Z_{av})$$

$$Z_{av} = (N_{s0}Z_{0i} + N_{s1}Z_{1i})/N_s$$

$$E_A \approx 0.0165 - 2.4 \times 10^{-8} N_{AD}^{1/3} \quad [8]$$

式中  $\epsilon_s$  为相对介电常数,  $\epsilon_0$  为真空介电常数;  $N_{AD}$  有效受主浓度;  $N_s$  为反型层子能带中电子

面密度,  $N_{s0}$ 、 $N_{s1}$  分别为两个子带中的电子;  $Z_{av}$  为反型层平均厚度; 在用以上方程描述反型层两子能带体系时, 同时假设了: (1) 在低温下 ( $T=4.2\text{K}$ ), 费米能级  $E_F$  钉扎在受主能级  $E_A$  上; (2) 材料中不存在共振缺陷态; (3) 耗尽区较厚, Zener 隧道效应可忽略。

当反型层两子能带体系总电子密度为  $N_s$  时, 可由(4)式求得费米能级:

$$E_F = \frac{\sqrt{(E_g - j_0 E_0 - j_1 E_1)^2/4 + E_0(E_g + E_0 - 2j_0 E_0) + E_1(E_g + E_1 - 2j_1 E_1) + E_g \pi \hbar^2 N_s / (2m_0^*)}}{(E_g - j_0 E_0 - j_1 E_1)/2} \quad (6)$$

对 MIS 器件来说, 实验测得的电容  $C$  是绝缘层电容  $C_i$  和半导体表面电容  $C_s$  的串联, 即:

$$C = C_i C_s / (C_i + C_s) \quad (7)$$

其中半导体表面电容  $C_s$  在耗尽区和反型区是不一样的。

在耗尽区:

$$\begin{aligned} C_s &= \epsilon_0 \epsilon_s e N_{AD} / [C_i (V_g - V_{fb})] \\ &= 1.42 \times 10^{-32} \epsilon_s N_{AD} / [C_i (V_g - V_{fb})] \end{aligned} \quad (8)$$

在反型区:

$$C_s = e(\partial N_s / \partial \Phi_s + N_{AD} \cdot \partial Z_d / \partial \Phi_s) \quad (9)$$

式中,  $V_{fb}$ 、 $V_g$  分别对应于  $C$ - $V$  谱中的平带电压和任一电压。由  $C$ - $V$  谱可求得对应于偏压  $V_g$  的反型层电子面密度:

$$N_s = C_i (V_g - V_{i0}) / e \quad (10)$$

$V_{i0}$  为 P-型 HgCdTe MIS 器件反型层第一子带开始填充电子时的阈值电压。

(9)式中的第一项  $\partial N_s / \partial \Phi_s = e / E_F \partial N_s$  可由(6)式及(3a)和(3b)式求得, 第二项  $\partial N_d / \partial \Phi_s$  则须从泊松方程求解。由(2)式解得当反型层电子面密度为  $N_s$  时, 表面势及两子能带电子的平均能量  $E_{av}$  为

$$\Phi_s = e(N_{AD} Z_d^2 + N_s Z_{av}) / (2\epsilon_s \epsilon_0) \quad (11)$$

$$E_{av} = e^2 [N_{AD}(2Z_d - Z_{av}) + N_s Z_{av}] / (2\epsilon_s \epsilon_0) \quad (12)$$

而从图 1 中可由  $E_0$ 、 $E_1$  近似求得  $E_{av}$ :

$$E_{av} = (N_{s0} E_0 + N_{s1} E_1) / N_s \quad (13)$$

因此可由(11—13)式求出(9)式中的第二项  $\partial Z_d / \partial \Phi_s$  为:

$$\partial Z_d / \partial \Phi_s = [1.105 \times 10^6 \epsilon_s + N_s \partial (Z_d - Z_{av}) / \partial \Phi_s - Z_{av} \partial N_s / \partial \Phi_s] / (2N_{AD} Z_d + N_s) \quad (14)$$

其中:

$$\partial (Z_d - Z_{av}) / \partial \Phi_s = 5.5 \times 10^5 \epsilon_s [1 - (\partial E_{av} / \partial N_s) (\partial N_s / \partial \Phi_s)] / (N_{AD} (Z_d - Z_{av})) \quad (15)$$

$$\partial E_{av} / \partial N_s = -E_{av} / N_s + (E_0 \partial N_{s0} / \partial N_s + N_{s0} \partial E_0 / \partial N_s + E_1 \partial N_{s1} / \partial N_s + N_{s1} \partial E_1 / \partial N_s) / N_s \quad (16)$$

$$\partial N_{s0} / \partial N_s = 1 - \partial N_{s1} / \partial N_s \quad (17)$$

$$\partial N_{s1} / \partial N_s = (\partial N_{s1} / \partial \Phi_s) (\partial \Phi_s / \partial N_s) \quad (18)$$

$$\partial N_{s1} / \partial \Phi_s = (\partial N_{s1} / \partial E_F) / e \quad (19)$$

$\partial N_{s1} / \partial \Phi_s$  可由(4c)和(6)式求得:

$$\partial N_{s1} / \partial \Phi_s = k [2E_F + E_g - 2j_1 E_1 + (4j_1 E_1 - 2j_1 E_F - 2E_1 - E_g) (\partial E_1 / \partial N_s) (\partial N_s / \partial \Phi_s)] \quad (20)$$

$$k = 4.1667 \times 10^{14} (m_0^* / m_0) / E_g \quad (21)$$

于是(9)式中的  $\partial Z_d / \partial \Phi_s$  可写成一个包含  $\partial E_0 / \partial N_s$ 、 $\partial E_1 / \partial N_s$  及  $\partial N_s / \partial \Phi_s$  的函数,并可由(3a)、(3b)和(6)式算得. 而  $Z_{av}$ 、 $Z_d$  也可由(11)、(12)式解出. 因此可用(7)、(8)式拟合耗尽区电容,而用量子限实验模型拟合<sup>[3]</sup>只有一个子带被填充时的电容谱,当第二子带开始填充时,则用本文给出的非量子限实验模型来拟合,从而求解出反型层子能带结构,包括  $E_0$ 、 $E_1$ 、 $E_F$ 、 $Z_d$ 、 $Z_{av}$  以及它们随反型层电子浓度  $N_s$  的变化关系.

拟合两子带电子贡献的电容谱过程是这样的:给定参数  $E_{10}$ 、 $E_{11}$ 、 $E_{12}$ ,对应某一偏压  $V$ ,由(10)式求得  $N_s$ ,然后求得  $E_F$ 、 $E_0$ 、 $E_1$ ,进而求得  $\partial N_s / \partial \Phi_s$ 、 $\partial N_{s1} / \partial \Phi_s$ 、 $\partial N_{s0} / \partial \Phi_s$ 、 $\partial E_0 / \partial N_s$ 、 $\partial E_1 / \partial N_s$ 、 $\partial E_{av} / \partial N_s$ 、 $\partial Z_d / \partial \Phi_s$ ,于是由(7)、(9)式即可算得电容值. 调节参数时要求  $E_1$  在阈值电压  $V_{t1}$  处正好等于由量子限实验模型在该阈值电压处拟合到的  $E_F$ ,因为此时电子刚填充第二子带.

当反型层中有三个或三个以上的子带填充电子时,可将本文模型一级一级外推并结合测得的  $C-V$  谱即可求解反型层多子能带体系.

### 3 结果与讨论

我们制备了  $x=0.213$  的  $\text{HgCdTe}$  MIS 器件样品,电极面积  $A=0.176\text{cm}^2$ ,材料掺杂浓度为  $N_{AD}=5.8 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ . 4.2K 温度下的低频电容谱见图 2. 从图中可见在反型区,电容有两个跃变;对应阈值电压  $V_{t0}$  跃变表明反型层第一个子带开始填充电子,而对应阈值电压  $V_{t1}$  的跃变则表明反型层第二子带开始填充电子. 由实验结果可得两阈值电压为:  $V_{t0}=-90.2\text{V}$ ,  $V_{t1}=-25.5\text{V}$ .

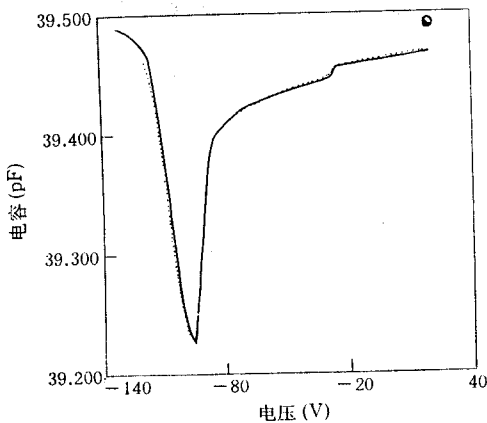


图 2 P-HgCdTe( $x=2.13$ )MIS 器件的  $C-V$  谱  
实线为实验测量结果( $T=4.2\text{K}$ ,  $f=233\text{Hz}$ )  
虚线为实验模型拟合结果

图 2 中的虚线是根据本文提出的非量子限电容谱模型及文献[3]中的量子限电容谱模型拟合得到的结果. 拟合参数为:  $\epsilon_s=16.5$ ,  $C_i=39.528\text{pF}$ ,  $V_{fb}=-120.2\text{V}$ ;  $j_0=0.8$ ,  $j_1=0.7$ ;  $E_{00}=0.0787\text{eV}$ ,  $E_{01}=1.1 \times 10^{-13}\text{eV} \cdot \text{cm}$ ,  $E_{02}=-1.1 \times 10^{-26}\text{eV} \cdot \text{cm}^2$ ;  $E_{10}=0.172\text{eV}$ ,  $E_{11}=1.1 \times 10^{-13}\text{eV} \cdot \text{cm}$ ,  $E_{12}=-1.0 \times 10^{-26}\text{eV} \cdot \text{cm}^2$ . 拟合同时得到的反型层子能带的结构,包括基态子能带能量  $E_0$ 、第一激发态子能带能量  $E_1$ 、费米能级、耗尽层厚度、反型层平均厚度以及它们随反型层电子浓度的变化关系见图 3、4.

图 3 是反型层子能带能量( $E_0$ 、 $E_1$ )的费米能级( $E_F$ )随反型层电子浓度及 MIS 结构上偏压的变化关系;实线为在量子限条件下由自治理论模型<sup>[5]</sup>算得的  $E_0$ 、 $E_F$  理论结果,虚线则是由电容谱拟合中得到的  $E_0$ 、 $E_1$ 、 $E_F$  实验结果. 从图中可看出,当加在该样品 MIS 器件上的偏压为  $-90.2\text{V}$  时,第一子带开始填充电子,当偏压增加到  $-25.5\text{V}$  时,  $N_s=9 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ ,第二子带开始填充电子,这时反型层电子浓度约为  $9 \times$

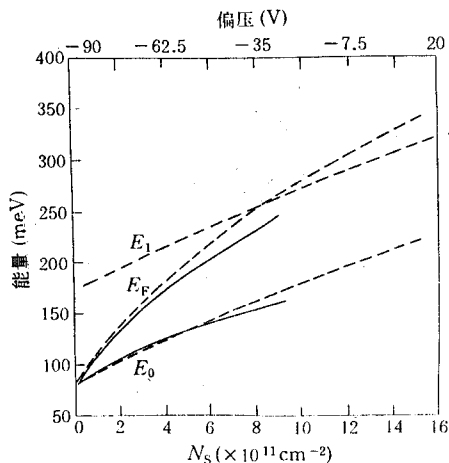


图3 反型层子能带量( $E_0$ 、 $E_1$ )、费米能级( $E_F$ )  
随反型层电子浓度及 MIS 结构偏压的变化关系

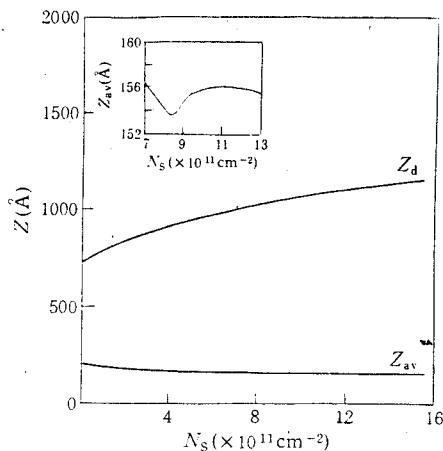


图4 耗尽层厚度及反型层平均厚度  
随反型层电子浓度的变化关系

$10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时. 第二子能带填充电子以前, 尤其当反型层电子浓度较低时,  $E_0$ 、 $E_F$  的理论与实验结果符合较好; 而当反型层电子浓度增大时, 二者符合程度变差, 这是因为文献[5]中的自洽模型理论是在反型层电子浓度较低的条件下载出的. 对于本文测量的 MIS 器件, 当反型层电子浓度从 0 增加到  $1.58 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 第一子带、第二子带带底能量分别从 80.14 meV 和 172 meV 增加到 223.36 meV 和 318.36 meV, 而  $E_F$  则从 80.14 meV 增加到 344.71 meV.

从图 4 中可看出反型层电子浓度从 0 增加到  $1.58 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 耗尽层厚度从 724 埃增大到 1161.4 埃, 而反型层平均厚度从 204.4 埃减小到 153.6 埃. 值得一提的是当第二子带开始填充电子时, 反型层平均厚度有一微弱的增加, 然后又随反型层电子浓度的增加而减小 (见图中小图), 这正是因为第二子带开始填充电子的缘故.

## 4 结论

推导并给出了非量子限条件下的电容谱实验模型. 测量了  $x=0.213$  的 HgCdTe MIS 器件在 4.2K 时的低频电容谱, 获得了有两个子带被电子占据时的实验结果, 并用导出的模型给出了该 MIS 器件在非量子限条件下的反型层子能带结构.

## 参 考 文 献

- [1] A. Ziegler and U. Rossler, Solid St. Commun., 1988, **65**:805.
- [2] J. H. Chu, Z. Y. Mi *et al.*, Phys. Rev. B, 1991, **44**(4):1717.
- [3] 褚君浩, R. Sizmann, F. Koch, 中国科学 A, 1990, **5**:515.
- [4] R. Sizmann, J. H. Chu *et al.*, Semicond. Sci. Technol., 1990, **5**:S111.
- [5] 刘坤, 褚君浩, 李标等, 物理学报, 1994, **43**(4):267.

- [6] 刘坤,褚君浩,欧海疆等,红外与毫米波学报,1994,13(5):369.
- [7] 褚君浩,红外研究,1985,4(6):439.
- [8] W. Scott, J. Appl. Phys., 1976, 47:1408.

## Excited State Structure of Inversion Layer in P-Type HgCdTe MIS Structure

Liu Kun, Chu Junhao, Li Biao and Tang Dingyuan

*(National Laboratory of Infrared Physics Shanghai)*

*Institute of Technical Physics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)*

Received 25 February 1994, revised manuscript received 22 April 1994

**Abstract** The  $C$ - $V$  spectrum of P-type HgCdTe ( $x=0.213$ ) metal-insulator-semiconductor (MIS) structure has been obtained at 4.2K. It was found that two subbands in the inversion layer were filled with electrons. Based on the fact that more than one subband in the inversion layer are filled with electrons, we have presented a model for the subband structure in this paper. Furthermore, we fitted the experimental  $C$ - $V$  data with this model, and obtained the structure for the subband system, which includes the ground state energy, first excited state energy, Fermi level, depletion layer width, inversion layer width and their dependence on the electron concentration in the inversion layer.

**PACC:** 7128, 7340Q