

碲镉汞异质结能带结构的优化设计*

全知觉† 孙立忠 叶振华 李志锋 陆 卫

(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)

(2005 年 5 月 17 日收到, 2005 年 12 月 26 日收到修改稿)

分别对带隙较宽(较窄)的 p 型材料在带隙较窄(较宽)的 n 型材料之上的碲镉汞(MCT)异质结的能带结构进行了理论分析. 在应用的理论模型中提出了一个简单的载流子浓度近似模型用于计入载流子简并效应和导带非抛物线性, 同时还考虑到了价带失配的影响. 就 p-n 结位置(z_B)和界面电荷密度(Q)两个参数对 MCT 异质结能带结构的影响进行了系统分析, 发现这些影响是不可忽略的. 根据这些影响特征, 进一步得出了 z_B 和 Q 参数之间的优化设计规律.

关键词: 碲镉汞(MCT), 异质结, 载流子浓度近似

PACC: 7280E, 7340L, 2940P

1. 引 言

碲镉汞(MCT)是 II-VI 族化合物 CdTe 和 HgTe 的固溶体, 它的禁带宽度可以随组分配比的变化在 $-0.3\sim 1.6\text{eV}$ 内调节, 利用它可做成各种响应波段的红外探测器, 这使它成为目前最受重视的红外探测器材料^[1, 2]. MCT 异质结与同质结相比有着更优良的应用前景, 它的出现极大地提高了 MCT 光伏探测器的性能. 但是, 异质结的能带结构中可能会形成少子势垒, 它阻挡了光生少子通过结的输运, 从而降低了探测器的性能^[3, 4]. 通过调节异质结的各种设计参数可以减小势垒高度甚至消除势垒的形成, 但由于参数数目众多且相互之间的关系非常复杂, 所以需要建立一个理论模型来对异质结的能带结构进行优化设计.

在这一方面前人已经做了大量工作. Migliorato 和 White(MW)^[5]考虑了组分和掺杂的互扩散作用计算了 MCT/CdTe 异质结的能带结构. Bratt 和 Casselman(BC)^[6]发展了 MW 模型, 使之适用于计算 MCT/MCT 任意组分之间的异质结. 但这两个模型都是建立在共阴离子规则之上, 即认为价带不失配, 而且他们的计算均没有考虑 MCT 材料的载流子简并

效应和导带结构非抛物线性. Madrasz 和 Szmulowicz(MS)^[7-10]在前面两个模型的基础上通过引入费米-狄拉克积分逐步将 MCT 材料的特性 1)载流子简并效应 2)导带结构非抛物线性和 3)价带失配的影响考虑进能带计算中. 但这种不作任何近似的数值积分计算使得计算时间大大增加, 从而限制了模型的推广, 使之只适用于平衡状态下泊松方程的求解. 另外 BC^[6]的研究已经表明通过控制 p-n 结和组分结的相对位置可优化异质结的能带结构, 但在 MS 的工作中假设了 p-n 结和组分结位置重合, 而没有研究两者相对位置的变化对能带结构的影响, 关于这方面的深入研究是本文的主要内容之一. 另外, 近年来的研究表明在异质结界面存在界面电荷^[11, 12]. 界面电荷的来源一般认为是由于晶格适配性问题和工艺引入. 尽管 HgCd/CdTe 之间的晶格适配 $< 0.3\%$, 但由于 HgCd 与 CdTe 极性强度不同, 在其异质结界面被认为会存在固定电荷, 其密度与工艺密切相关, 随工艺不同而变, 因此电荷密度是不可控的, 且可正可负, 在通常情况下是不能精确地知道其密度值^[11]. 一般认为 HgCd/CdTe 界面电荷密度在 $\pm 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 量级, 而 MCT/MCT 界面电荷密度随 Cd 组分梯度线性变化^[13]. 这样一个量级的界面电荷对异质结处的能带结构影响是不可忽略的, 所以研

* 国家重点基础研究专项基金(批准号: 2004CB619004, 2001CB309302)和国家自然科学基金(批准号: 60476031, 10234040, 60244002)资助的课题.

† E-mail: quanzj@mail.sitp.ac.cn

究界面电荷在能带结构中的影响对完善能带设计模型也是非常必要的,为此本文还进一步考虑了界面电荷的作用.本文将针对上述问题,在模型上充分考虑了 1) 载流子简并效应 2) 导带结构非抛物线性和 3) 价带失配三方面的影响,并通过提出一种有效的近似表达式,使得费米-狄拉克积分得以快速计算,既满足了通常设计计算的速度要求,又使得所采用的模型在精度上得以提高,同时在这样的模型上提出了减弱界面电荷影响的可行性方案.

本文介绍了能带计算的基本理论模型,给出了计算结果以及相关讨论,包括如下三个方面: 1) 在组分结位置固定的情况下,研究 p-n 结位置 z_B 对能带结构的影响 2) 界面电荷密度 Q 对能带结构的影响 和 3) 参数 z_B 和 Q 的优化设计.

2. 理论模型

2.1. 泊松方程

设 z 为位置坐标, $0 < z < L$, L 为器件的长度. 在本文的计算中,器件长度 $L = 4\mu\text{m}$. 设 $z = 0$ 点的价带顶为能量零点,泊松方程可表示为

$$\nabla^2\psi = -\frac{q}{\epsilon_s\epsilon_0}[p - n + N_d^+ - N_a^- + Q_e] - \frac{1}{\epsilon_s}\nabla\psi\nabla\epsilon_s, \quad (1)$$

式中 ψ 为静电势, ϵ_0 为真空介电常数, ϵ_s 为相对介电常数, p 为空穴浓度, n 为电子浓度, N_d^+ 为电离施主浓度, N_a^- 为电离受主浓度, Q_e 为界面电荷分布函数. 在计算中,我们假设施主和受主全部被电离.

HgTe/CdTe 异质结的价带失配为 $0.35\text{eV}^{[14,15]}$, MCT/MCT 异质结的价带失配值随组分之差线性变化.

界面电荷分布沿着 z 方向用高斯函数来表述:

$$Q_e(z) = Q \cdot \exp\left[-\frac{(z - z_Q)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (2)$$

在本文中,将以界面电荷分布的峰值密度 Q 作为界面电荷参数进行计算. 由于界面电荷的产生主要来源于异质结两边材料之间的晶格失配,所以界面电荷的分布与组分结的位置及组分缓变宽度有关. 我们假设函数的中心位置 z_Q 与组分结位置 z_c 重合,半高宽 $\sigma = 0.25W_c$, W_c 为 Cd 组分缓变宽度.

2.2. 载流子浓度近似

考虑载流子简并效应和导带结构非抛物线性后, MCT 的载流子浓度可以通过下式计算得到^[16,17]:

$$n = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}(1 + \alpha\epsilon)^{3/2}(1 + 2\alpha\epsilon)}{\exp(\epsilon - \phi) + 1} d\epsilon, \quad (3)$$

其中 $\epsilon = (E - E_c)/kT$ 是简约电子能量; $\phi = (E_f - E_c)/kT$ 是简约费米能级; $\alpha = \frac{1}{\epsilon_g} \left(1 - \frac{m_e^*}{m_0}\right)^2$ 是非抛物因子, $\epsilon_g = E_g/kT$ 是简约能隙宽度, m_e^* 是电子有效质量; N_c 是导带有效态密度.

为减少计算时间,并能适用于非平衡状态泊松方程的求解,在本文提出了对 Ariel 模型^[17]的修正,增加了三个参数 α_1 、 α_2 和 B_2 , 得到一个新的近似:

$$\phi = \ln \frac{n}{B_0 N_c} + B_1 \left(\frac{n}{N_c}\right)^{\alpha_1} + B_2 \left(\frac{n}{N_c}\right)^{\alpha_2}, \quad (4a)$$

式中

$$B_0 = 1 + 3.75\alpha + 3.281\alpha^2 - 2.461\alpha^3,$$

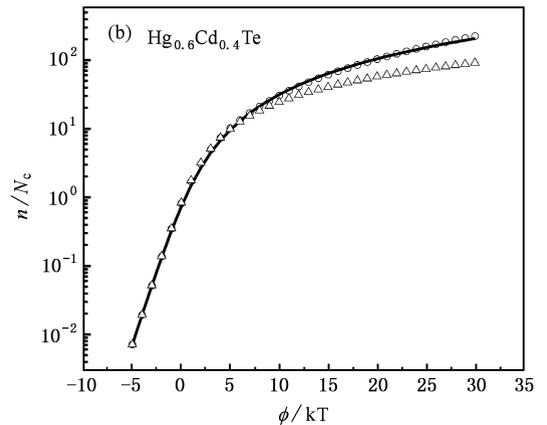
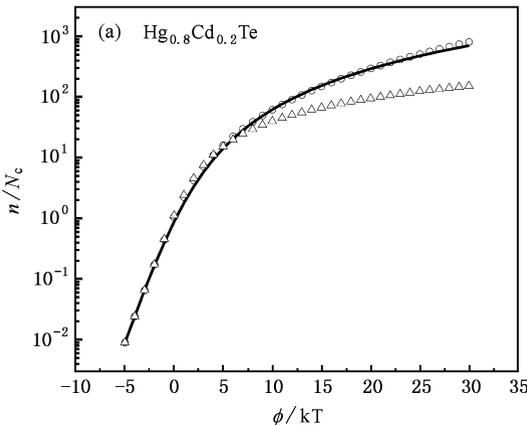


图 1 80K 下 (a) $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 与 (b) $\text{Hg}_{0.6}\text{Cd}_{0.4}\text{Te}$ 中本文的载流子浓度近似模型与 Ariel 模型、数值积分解计算得到的载流子浓度随简约费米能级的变化曲线的比较. \circ 表示精确数值积分解, \triangle 表示 Ariel 模型, 实线表示本文的载流子浓度近似.

$$B_1 = 0.994 - 3.333\alpha ,$$

$$\alpha_1 = 0.526 + 0.236\exp\left(-\frac{\alpha + 0.00211}{0.0279}\right) ,$$

$$\alpha_2 = 0.624 - 12.8\alpha + 128\alpha^2 - 541\alpha^3 ,$$

$$B_2 = -(0.577 - 7.93\alpha + 78.6\alpha^2 - 349\alpha^3) .$$

图 1 对比了新模型式(4a)与精确的数值积分式(3)的计算结果,也给出了 Ariel 模型计算结果的比较.图中显示,不管长波(图 1(a))还是中波(图 1(b)),在 $\phi < 30$ 的范围内,新的模型与数值积分解符合得很好.

对于空穴浓度近似,可以得出类似于(4a)式的表达式

$$-\phi - \epsilon_g = \ln \frac{p}{B_{0v}N_v} + B_{1v} \left(\frac{p}{N_v}\right)^{\alpha_{1v}} + B_{2v} \left(\frac{p}{N_v}\right)^{\alpha_{2v}} \quad (4b)$$

重空穴价带是抛物线性,其非抛物因子 α 为零,代入到(4a)式中 5 个与非抛物因子有关的参数中求得系数 $B_{0v} = 1, B_{1v} = 0.944, B_{2v} = -0.577, \alpha_{1v} = 0.745$ 和 $\alpha_{2v} = 0.624$.

3. 结果与讨论

为了叙述方便,我们记带隙较宽(较窄)的 p 型 MCT 材料在带隙较窄(较宽)的 n 型 MCT 材料之上的 p-n 结构分别为“Pn”结和“pN”结.则图 2 给出了 pN 和 Pn 两种结构的不同组分缓变宽度 W_c 的能带结构.图 2(a)(b)分别与文献[6]中的图 1 和图 5 对比,它们之间符合很好,证明了采用近似模型(2)具有足够高的精度,可以应用到能带设计中.

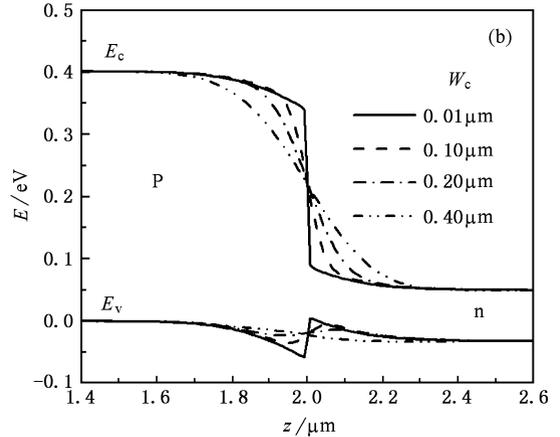
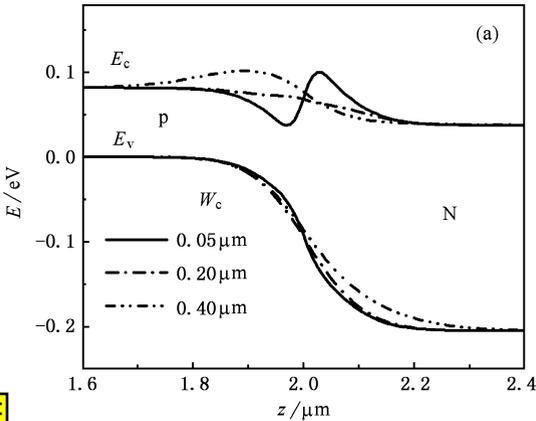


图 2 温度 77K 下,不同组分缓变宽度 W_c 的能带空间分布图对比 (a) pN 结构,参数值: $x_n = 0.3, x_p = 0.2, N_a = N_d = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$; (b) Pn 结构,参数值: $x_n = 0.2, x_p = 0.4, N_a = N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

3.1 p-n 结位置 z_B 的影响

图 3(a)为不同 z_B 值的考虑价带失配 Pn 结构的能带图对比,得到随着 p-n 结进入窄禁带材料,势垒减少但同时出现一个势阱,并且势阱深度不断增加.势阱的出现同样会降低器件性能,因此在这种情况下,应当尽量避免 p-n 结进入窄禁带材料.图 3(b)为不同 z_B 值的考虑价带失配 pN 结构的能带结构对比.

从图 3 可以看出,对于 pN 结构,当 p-n 结进入窄带隙区,将使得导带的势垒降低,势阱出现;当 p-n 结进入宽带隙区,将使得导带的势阱变浅,势垒增高.对于 Pn 结构,当 p-n 结进入窄带隙区,将使得价带的势垒降低,势阱出现;当 p-n 结进入宽带

隙区,将使得价带的势阱变浅,势垒增高.

3.2. 界面电荷密度 Q 的影响

图 4 为界面电荷对能带结构的影响.在 pN 结构中,界面电荷的出现影响导带形状.当界面电荷为正时,降低导带电子势垒;界面电荷为负时,使得导带电子势垒增高.在 Pn 结构中,界面电荷的出现影响价带形状.当界面电荷为正时,使价带空穴势垒增高;当界面电荷为负时,降低价带空穴势垒高度,增加空穴势阱的深度.

3.3. 参数 z_B 和 Q 的最优化

图 5 显示了界面电荷为负时,不同 z_B 之间的 pN 和 Pn 结构能带结构对比.由图可知,对于 pN 结

构,通过调节 p-n 结的位置能降低由于界面负电荷造成导带电子势垒的高度,但当势垒降低到一定程度时

度时会伴随着势阱的出现.对于 Pn 结构,通过调节 p-n 结的位置能达到减小由于界面负电荷造成的

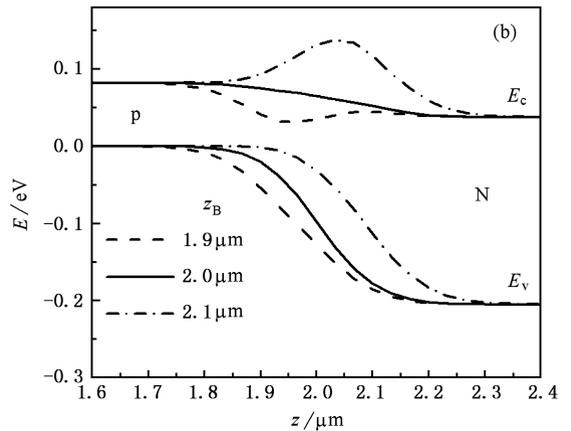
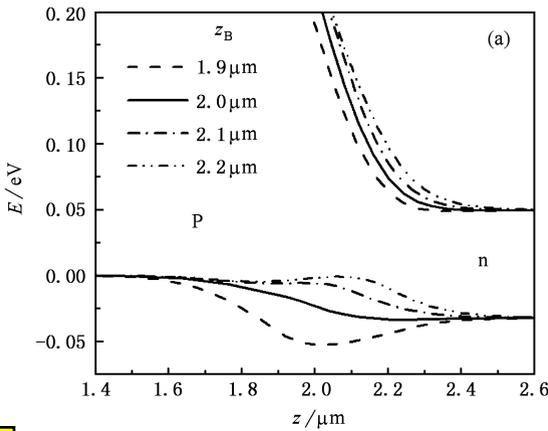


图 3 温度 77K 下,不同 p-n 结位置 z_B (如图所示)的能带空间分布图对比 (a)Pn 结构,参数值: $x_n = 0.2, x_p = 0.4, N_a = N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}, W_c = 0.4 \mu\text{m}$ (b)pN 结构,参数值: $x_n = 0.3, x_p = 0.2, N_a = N_d = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}, W_c = 0.2 \mu\text{m}$

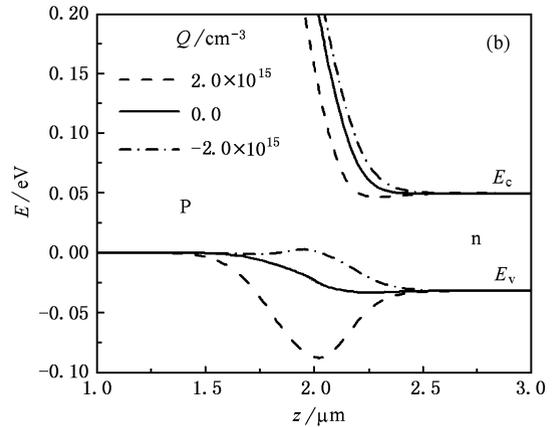
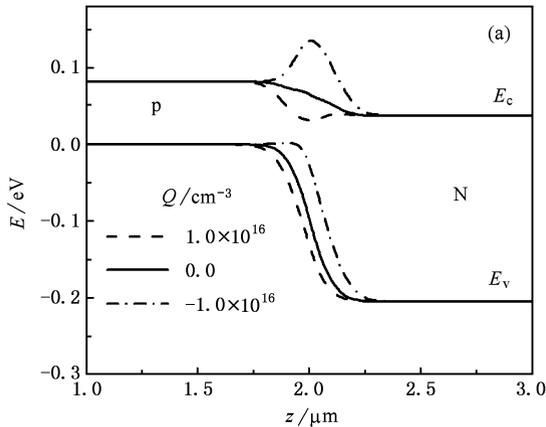


图 4 温度 77K 下,不同 Q (如图所示)的能带空间分布图对比 (a)pN 结构,参数值: $x_n = 0.3, x_p = 0.2, N_a = N_d = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}, W_c = 0.2 \mu\text{m}$; (b)Pn 结构,参数值: $x_n = 0.2, x_p = 0.4, N_a = N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}, W_c = 0.4 \mu\text{m}$

价带空穴势阱深度的作用.

图 6 显示了界面电荷为正时,不同 z_B 之间的 pN 和 Pn 结构能带结构对比.由图可知,对于 pN 结构,通过调节 p-n 结的位置能减少由于界面正电荷造成的导带电子势阱的深度.对于 Pn 结构,通过调节 p-n 结的位置能降低由于界面正电荷造成的价带空穴势垒高度.

由图 5 和图 6 可知,调节 p-n 结的位置对消除由于界面电荷造成的影响是有限的,这个限度取决于界面电荷密度的大小.当相对于某种器件结构的界面电荷密度足够低,可以通过微调 p-n 结位置

来消除势垒或势阱,如图 5(b);而当界面电荷密度达到一定值时,微调 p-n 结位置只能起到减小势垒高度或势阱深度的作用,进一步的改变组分结位置将会产生另一势阱或势垒,如图 5(a)和图 6.

从图 5 和图 6 可以得出参数 z_B 和 Q 之间的优化设计规律.对于 pN 结构,界面电荷为负时,应使 p-n 结的位置偏向窄带隙材料;当界面电荷为正时,应使 p-n 结的位置偏向宽带隙材料.对于 Pn 结构,界面电荷为负时,应使 p-n 结的位置偏向宽带隙材料;当界面电荷为正时,应使 p-n 结的位置偏向窄带隙材料.

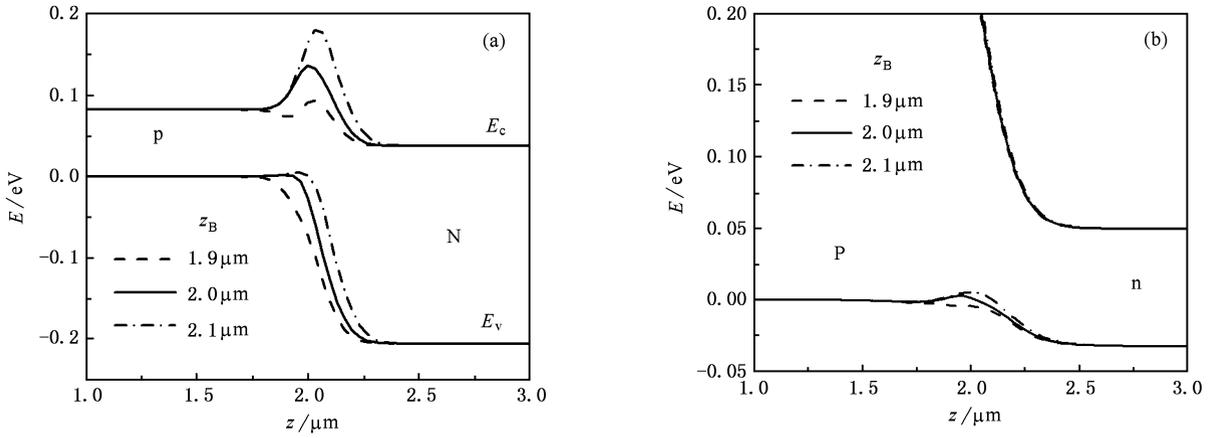


图5 温度 77K 下,界面电荷为负时,不同 p-n 结位置 z_B (如图所示)的能带空间分布图对比 (a) pN 结构,参数值: $x_n = 0.3$, $x_p = 0.2$, $N_a = N_d = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $W_c = 0.2 \mu\text{m}$, $Q = -1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; (b) Pn 结构,参数值: $x_n = 0.2$, $x_p = 0.4$, $N_a = N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $W_c = 0.4 \mu\text{m}$, $Q = -2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

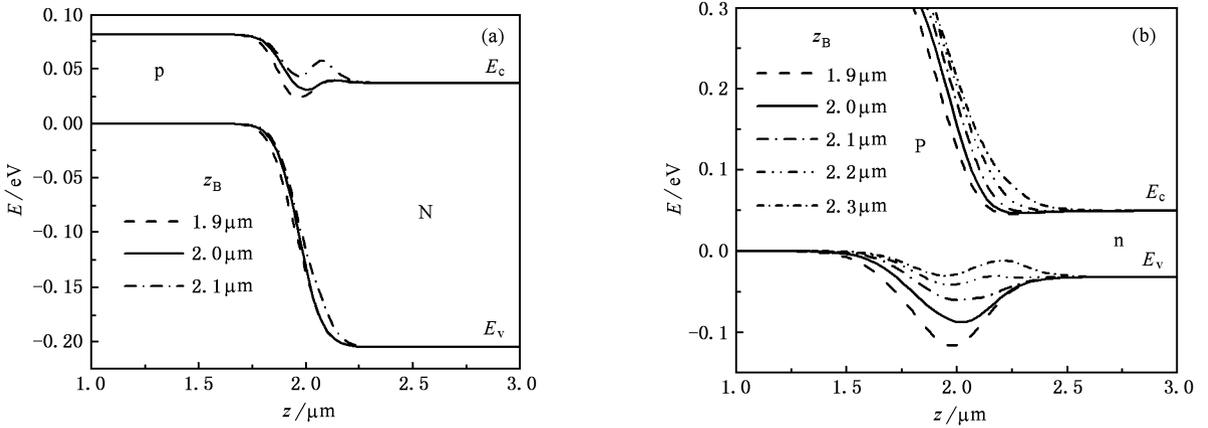


图6 温度 77K 下,界面电荷为正时,不同 p-n 结位置 z_B (如图所示)的能带空间分布图对比 (a) pN 结构,参数值: $x_n = 0.3$, $x_p = 0.2$, $N_a = N_d = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $W_c = 0.2 \mu\text{m}$, $Q = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; (b) Pn 结构,参数值: $x_n = 0.2$, $x_p = 0.4$, $N_a = N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $W_c = 0.4 \mu\text{m}$, $Q = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

4. 结 论

我们将一个简单的载流子浓度近似模型应用于计算 MCT 异质结的能带结构,这个近似模型具有足够高的精度,可以用来进行能带结构的优化设计.计算结果表明,对于 pN 结构,当 p-n 结位置进入窄带隙区或界面电荷为正时,使得导带电子势垒降低;当 p-n 结位置进入宽带隙区或界面电荷为负时,使得导带电子势垒增高.对于 Pn 结构,当 p-n 结位置进

入窄带隙区或界面电荷为负时,使得价带的势垒降低;当 p-n 结位置进入宽带隙区或界面电荷为正时,使得价带空穴势垒增高.进一步的研究得出了参数 p-n 结位置 z_B 和 Q 之间的优化设计规律:对于 pN 结构,界面电荷为负时,应使 p-n 结的位置偏向窄带隙材料;当界面电荷为正时,应使 p-n 结的位置偏向宽带隙材料.对于 Pn 结构,界面电荷为负时,应使 p-n 结的位置偏向宽带隙材料;当界面电荷为正时,应使 p-n 结的位置偏向窄带隙材料.

- [1] Sun Li-Zhong , Chen Xiao-Shuan *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1756 (in Chinese) 孙立忠、陈效双等 2005 物理学报 **54** 1756]
- [2] Chen G B , Lu W , Cai W Y *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 911 (in Chinese) 陈贵宾、陆 卫、蔡伟颖等 2004 物理学报 **53** 911]
- [3] Kosai K , Radford W A 1990 *J. Vac. Sci. Technol.* **A8** 1254
- [4] Wenus J , Rutkowski J 2002 *Phys. Stat. Sol. (b)* **229** 1093
- [5] Migliorato P , White A M 1983 *Solid State Electronics* **26** 65
- [6] Bratt P R , Casselman T N 1983 *J. Vac. Sci. Technol.* **A3** 238
- [7] Madrasz F L , Szmulowiz F 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 3267
- [8] Madrasz F L , Szmulowiz F 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 6373
- [9] Madrasz F L , Szmulowiz F 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 3082
- [10] Madrasz F L , Szmulowiz F 1989 *SPIE* **1106** 117
- [11] Djaloshinski L , Nemirowsky Y 1996 *Solid State Electronics* **39** 1385
- [12] Nemirowsky Y , Gordan G , Goren D 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 1113
- [13] Goren D , Asa G , Nemirowsky Y 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 5083
- [14] Johnson N F , Hui P M , Ehrenreich H 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1993
- [15] Shih C K , Spicer W E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2594
- [16] Bhan R K , Dhar V 2004 *Semicond. Sci. Technol.* **19** 413
- [17] Ariel V 1992 *IEEE Trans. Elec. Dev.* **39** 1312

Optimization design of the band profiles of HgCdTe heterojunctions *

Quan Zhi-Jue Sun Li-Zhong Ye Zhen-Hua Li Zhi-Feng Lu Wei

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

(Received 17 May 2005 ; revised manuscript received 26 December 2005)

Abstract

In this paper , the band profiles of HgCdTe (MCT) heterojunctions with the configuration of wide/narrow gap-p on narrow/wide gap-n are calculated , respectively . In the theoretical model employing a valence band offset , a new simple carrier density approximation is proposed to include the carrier degeneracy and conduction band non-parabolicity in the calculations . The effects of the location of p-n junction (z_B) and the interface charge density (Q) on the band profiles of MCT heterojunctions are studied systemically , which is found to be significant and can ' t be neglected . With the help of the results of above research , the optimal design related to z_B and Q is obtained .

Keywords : HgCdTe (MCT) , heterojunction , carrier density approximation

PACC : 7280E , 7340L , 2940P

* Project supported by the Chinese National Key Basic Research Special Fund (Grant Nos. 2004CB619004 , 2001CB309302) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60476031 , 10234040 , 60244002) .