

# p-HgCdTe 反型层中子能带 电子的基态能量

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

(1993 年 4 月 13 日收到)

用变分自洽方法求解了 p-HgCdTe 金属-绝缘体-半导体 (MIS) 结构 N 型反型层子能带的基态能量  $E_0$  及其与表面电子浓度的关系。计算中考虑了窄禁带半导体  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  带间相互作用所引起的非抛物带结构、波函数平均效应、共振缺陷态、Zener 隧穿、以及电场在屏蔽长度内的衰减等因素, 导出了子能带基态能量  $E_0$  的计算公式并获得了与实验符合较好的结果。

PACC: 7128;7340Q

## 一、引 言

窄禁带半导体  $\text{p-Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  反型层子能带电子行为的研究是一个很有意义的问题,特别是确定子能带电子基态能量  $E_0$  更是一个基本和重要的题目,也是研究子能带电子朗道能级和磁光共振的基础<sup>[1]</sup>。最近作者之一根据 p-HgCdTe 金属-绝缘体-半导体 (MIS) 结构的量子电容谱、磁导振荡谱以及回旋共振谱来确定子能带结构,包括基态子能带能量  $E_0$ 、子能带电子有效质量、反型层及耗尽层的厚度、费密能级以及它们随表面电子浓度变化的规律<sup>[2]</sup>。这就首次提供了 HgCdTe 反型层子能带电子基态能量  $E_0$  的定量实验结果,可以作为理论计算结果的比较。在理论方面已有一系列的计算工作,使用的模型已从单带发展到多带。无论哪种模型,都必须从泊松方程和薛定谔方程着手,由于两方程相互关联,因此必须通过计算机进行自洽求解。其计算过程很复杂,与实验结果符合得也不理想<sup>[3]</sup>。Stern<sup>[4]</sup> 曾用变分方法成功地描述了象 Ge, Si 一类宽带半导体的反型层子能带结构,本文中将对这一方法进行修正,以便用来描述 p-HgCdTe MIS 结构的反型层子能带结构,修正中考虑了窄禁带半导体 HgCdTe 带间相互作用所引起的非抛物带结构、波函数平均效应、P 型材料中的共振缺陷态、MIS 结构在反型时的共振隧穿等影响因素,获得了与实验数据符合较好的计算结果,这些结果包括基态能量及其与表面电子浓度的关系。

## 二、理论模型

### 1. 理想情形

把 Stern 模型用于 HgCdTe 反型层子能带结构时,必须考虑到带间相互作用,这在一定程度上可以通过 Kane 模型得出的非抛物物带结构以及与能量相关的子能带电子有效质量  $m^*(E)$  体现出来<sup>[2,5]</sup>. 图 1 表示 p-HgCdTe MIS 结构在反型时能带弯曲情况.  $E(z) = -\Phi(z)$  代表距表面  $z$  处的势的负值,  $D(E)$  为子能带电子态密度;  $E_g$  为禁带宽度,  $E_0$  为基态子能带能量,  $E_F$  为费密能级,  $E_c$  为导带底,  $E_v$  为价带顶,  $E_R$  为共振缺陷态能级到导带底的能量,  $E_A$  为受主电离能;  $z_{av}$  代表子能带电子平均分布位置,  $z_R$  为从表面到  $E_R$  浸入费密能级以下部分的距离,即在  $z < z_R$  范围  $E_R$  位于费密能级以下,  $z_i$  为反型层厚度,  $z_d$  为耗尽层厚度. 引入分布参数  $j = z_{av}/z_i$  来描述波函数平均效应,则  $E - E_0 j$  为子能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[2,10],反型层子能带电子有效质量  $m^*(E)$  可表示为

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

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  $m_0^*$ .

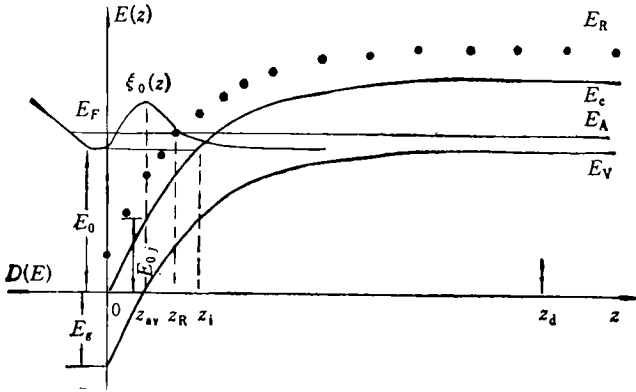


图 1 p-HgCdTe MIS 结构反型时的能带弯曲示意图

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. HgCdTe 反型层子能带电子有效质量小,态密度较低,可忽略子带中电子间相互作用;同时假设以下几个条件满足: 1) 在  $T = 4.2 \text{ K}$  时,体系处于量子极限状态且费密能级  $E_F$  钉扎在受主能级  $E_A$  上; 2) 材料中没有共振缺陷态; 3) MIS 结构耗尽区足够厚以至不会发生 Zener 隧道效应; 4) 耗尽区电荷在过渡区中迅速地降为零. 于是可用下面一组较简单方程描述这个子能带体系:

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

$$\frac{d^2 \zeta_s(z)}{dz^2} + \frac{2m^*(E)}{\hbar^2} [E_0 + e\Phi(z)] \zeta_s(z) = 0, \quad (3)$$

$$e\Phi_s = (E_R - E_A) + E_F \quad (4)$$

$$N_s = \int_{E_i}^{E_F} D(E) dE = \int_{E_0}^{E_F} \frac{m^*(E)}{\pi \hbar^2} dE, \quad (5)$$

$$z_i = \int_0^\infty z \zeta_0^2(z) dz / \int_0^\infty \zeta_0^2(z) dz, \quad (6)$$

$$z_{sv} = \int_0^{z_i} z \zeta_0^2(z) dz / \int_0^{z_i} \zeta_0^2(z) dz, \quad (7)$$

$$z_R = (E_F - E_R) z_i / E_s, \quad (8)$$

其中

$$\begin{aligned} \rho_{\text{depl}}(z) &= 0 \quad (z > z_d), \\ \rho_{\text{depl}}(z) &= -e(N_A - N_D) = -eN_{AD} \quad (0 < z < z_d), \\ \rho_s &= -eN_s / z_i \quad (0 < z < z_i), \\ E_A &= 0.0165 - 2.4 \times 10^{-8} N_A^{1/3[12]}, \end{aligned}$$

$\epsilon_s$  为 HgCdTe 相对介电常数;  $\epsilon_0$  为真空介电常数;  $N_A, N_D$  及  $N_{AD}$  分别为受主浓度、施主浓度和有效受主浓度, 对高掺杂样品取  $N_A = N_{AD}$ ;  $N_s$  为反型层子能带中电子面密度. (4) 式中  $e\Phi_s$  为表面能带总弯曲量, (4) 式等号右边第一项为体内导带底  $E_c$  到费密能级  $E_F$  的能量差, 第二项为费密能级在表面处距导带底的能量.  $\zeta_0(z) = (b^3/2)^{1/2} \cdot z \exp(-bz/2)$  为零级 Fang-Haward 函数<sup>[6]</sup>,  $b$  为参数. 由其构成的函数  $\Psi_s(x, y, z) = \zeta_0(z) \exp(i\theta_z) \cdot \exp(ik_x x + ik_y y)$  为基态子能带电子波函数,  $\theta_s$  为一与波矢  $k_x, k_y$  有关的量.

边界条件为

$$\Psi_s(x, y, z = 0) = 0, \quad (9a)$$

$$\Psi_s(x, y, z = z_d) = 0. \quad (9b)$$

对 p-HgCdTe MIS 结构而言这是一个较好的近似, 因为绝缘层 ZnS 禁带带宽为 3.6 eV, 远大于  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x \approx 0.20$ ) 的带宽 ( $\sim 0.1$  eV), 因此可以忽略波函数在介质中的穿透. 考虑到少量电子填充基态子能带并计及波函数平均效应, 可用一平均有效质量  $m^*$  代替  $m^*(E)$ . 利用上述边界条件, 求解(2), (3) 式得基态子能带能量为

$$E_s = \hbar^2 b^2 / 8m^* + (3e^2 / \epsilon_s \epsilon_0 b) [N_{\text{depl}} + 11N_s / 16 - 2N_{AD} / b], \quad (10)$$

其中  $N_{\text{depl}}$  为耗尽层中有效受主面密度. 此时有  $\partial E_s / \partial b = 0$ , 于是可得到基态子能带参数为

$$E_0 = E_{00} + \delta E_0$$

$$E_{00} = (3/2)^{(5/3)} (e^2 \hbar / \sqrt{m^*} \epsilon_s \epsilon_0)^{2/3} (N_{\text{depl}} + 55N_s / 96) / (N_{\text{depl}} + 11N_s / 32)^{1/3}, \quad (11)$$

$$\delta E_0 = (-2N_A e^2 z_i^2 / 3\epsilon_s \epsilon_0) (N_{\text{depl}} + 11N_s / 96) / (N_{\text{depl}} + 11N_s / 32),$$

$$z_i = \{ (N_s + 2N_{AD} z_d) + [(N_s + 2N_{AD} z_d)^2 - 8N_{AD} \epsilon_s \epsilon_0 E_0 / e]^{1/2} \} / (-2N_{AD}), \quad (12)$$

$$N_{\text{depl}} = N_{AD} z_d = (2\epsilon_s \epsilon_0 N_{AD} \Phi_s / e)^{1/2}. \quad (13)$$

表面势  $\Phi_s$  可由(4)式求得, 费密能级  $E_F$  则可由(5)式积分得到

$$\begin{aligned} E_F &= -(E_g - 2jE_0) / 2 + [(E_g - 2jE_0)^2 / 4 + E_0(E_g + E_0 - 2jE_0) \\ &\quad + E_g \pi \hbar^2 N_s / m_0^*]^{1/2}. \end{aligned} \quad (14)$$

(11)–(14) 式是相互关联的, 通过自洽计算可以算得  $E_s(N_s = 0)$ ,  $E_s(N_s)$  和  $E_F(N_s)$ .

## 2. 实际情形

以上只考虑了窄带半导体带间相互作用对  $E_s$  的影响从而引入子带有效质量  $m^*$ , 并在理想情形下导出了  $E_s$  的计算公式。

但实际 MIS 器件中还存在其它影响因素, 必须对上面计算公式进行修正。

1) 在耗尽区内,  $N_{AD}$  基本保持为常数, 但从耗尽区到体内的过渡区中, 耗尽区电荷并不是陡然地降为零的, 而是在一定的屏蔽长度  $\lambda_p$  内指数地衰减为零的。这个屏蔽长度内的电荷对  $E_s$  的影响体现在它对表面能带弯曲的贡献, 其大小可表示为  $e\Phi_s^{(1)} = -kT^{[3]}$ 。该项在低温下影响较小。

2) 对于高掺杂 ( $N_{AD} > 10^{17}/\text{cm}^3$ )

图2 p-HgCdTe MIS 结构反型时的 Zener 共振隧穿示意图

$x = 0.21$  的 p-HgCdTe 样品, 曾有理论计算表明, 阳离子空位被氧、铝、硅等原子占据后就形成一系列能级位于导带底以上的共振缺陷态。近来实验也发现在导带底与子能带基态  $E_s$  之间存在一个受主型的共振缺陷态, 它距导带底约 45meV, 浓度  $N_R$  大多为 30%—40%  $N_A$ , 一般情况下不束缚电子而呈中性<sup>[11]</sup>。在上述理想情形, 只考虑到反型时子能带基态上填有电子, 实际上存在共振缺陷态时, 共振缺陷态上也会填充电子且比基态填得早, 因而对  $E_s$  也有影响。它的存在一方面相当于使反型层电子面密度有一大小为  $N_R z_R$  的附加贡献, 另一方面使表面能带弯曲有一附加量:  $e\Phi_s^{(2)} = -e^2 N_R z_R^2 / \epsilon_s \epsilon_0$ 。

3) 由于 p-Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te 的子能带能量  $E_i (i = 0, 1, \dots)$  可与禁带宽度  $E_g$  相比, 而且对高掺杂样品, 条件  $(E_F - E_s) > E_A$  很容易满足, 因此子能带较易位于连续的价带以下, 这时电子就有可能共振隧穿到简并的价带态, 从而导致反型层子能带能级的移动和展宽, 这就是 Zener 效应。Brenig 等人<sup>[7,8]</sup>曾引入 Zener 项研究了该效应对反型层子能带能级的影响, Rossler<sup>[9]</sup> 也对此进行过详细的讨论, 但他们的计算都较复杂。在此我们将运用较简便的方法处理这一问题。图2为 Zener 共振隧穿示意图, 图2中各量的物理意义同图1, 电子从反型层子能带能量为  $E$  的能级共振隧穿到简并的价带态概率为

$$T \approx \exp \left\{ \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} [2m^*(U(z) - E)]^{1/2} dz \right\}, \quad (15)$$

其中

$$z_1 = (z_i/E_0)E, \quad z_2 = (z_i/E_0)(E + E_g), \quad U(z) = (E_s/z_i)z,$$

于是

$$T_{inv \rightarrow val} = \exp[-4(2m^*)^{1/2} E_g^{3/2} z_i / 3\hbar E_0]. \quad (16)$$

可见隧穿概率只与禁带宽度  $E_g$ 、反型层厚度  $z_i$ 、反型层子能带电子基态能量  $E_s$  及子能带平均有效质量  $m^*$  有关,  $E_g, z_i$  越小, Zener 隧穿效应越显著。从反型层隧穿到价

带的电子数为

$$N_{ST} = \int_{E_0}^{E_v} T(E)D(E)dE \approx N_s \exp[-6.58 \times 10^9 (m^*/m_0)^{1/2} (E_g^{3/2}/E_0) z_i], \quad (17)$$

其中能量单位取 eV, 厚度单位取  $m$ . 这部分隧穿电子对  $E_0$  的影响可以从两方面考虑: *a.* 对反型层中总电子面密度贡献大小为  $-N_{ST}$ ; *b.* 对表面能带弯曲贡献为  $e\Phi_s^{(3)} = e^2 N_{ST} z_i / \epsilon_s \epsilon_0$ .

综合以上各种影响因素, (11)–(13)式中的  $\Phi_s, N_s$  应修正为  $\Phi_s^*, N_s^*$ , 而(14)式中的  $N_s$  应修正为  $N_s - N_{ST}$ , 因为它是由子带积分得到的.

$$\Phi_s^* = \Phi_s + \Phi_s^{(1)} + \Phi_s^{(2)} + \Phi_s^{(3)}, \quad (18)$$

$$N_s^* = N_s + N_R z_R - N_{ST}. \quad (19)$$

代入已知物理参数, 修正后的(11)–(14)式可写成以下计算形式:

$$e\Phi_s^* = (E_g - E_A + E_F - kT - e^2 N_R z_R^2 / \epsilon_s \epsilon_0 + e^2 N_{ST} z_i / \epsilon_s \epsilon_0), \quad (20)$$

$$N_{dep1} = 1.110 \times 10^4 [\epsilon_s N_{AD} \Phi_s^*]^{1/2}, \quad (21)$$

$$\delta E_0 = -1.2 \times 10^{-8} N_{AD} z_i^2 (N_{dep1} + 11N_s^*/96) / (N_{dep1} + 11N_s^*/32) \epsilon_s, \quad (22)$$

$$E_{00} = 5.6 \times 10^{-12} (m^*/m_0)^{-1/3} \epsilon_s^{-2/3} (N_{dep1} + 55N_s^*/96) (N_{dep1} + 11N_s^*/32)^{-1/3},$$

$$E_0 = E_{00} + \delta E_0,$$

其中能量单位为 eV, 长度单位为 m, 面积单位为  $m^2$ . (20)–(22)式中某些物理量是彼此相关的, 通过自洽计算就能得到反型层结构参数, 下节将给出详细计算结果.

### 三、计算结果与讨论

通过(20)–(22)式的计算可以得到 HgCdTe 的反型层子能带结构, 包括基态子能带能量  $E_0$ 、反型层及耗尽层的厚度、费密能级以及它们随表面电子浓度变化的规律. 根据(6), (7)式可以算得  $j = 0.612$ .

图3给出  $x = 0.21$  样品的  $E_0, E_F$  随表面反型层电子浓度  $N_s$  变化的计算结果. 实验点及有关参数根据文献[11]取  $T = 4.2K, \epsilon_s = 17, N_{AD} = 1.87 \times 10^{17} cm^{-3}, N_R = 9 \times 10^{16} cm^{-3}, E_R = 45 meV$ . 在表面反型层电子浓度为  $N_s$  时, 电子填充在  $E_0$  与  $E_F$  之间, 考虑到电子的费密-狄拉克分布和波函数平均效应, 计算中取距导带底  $(E_F - E_0)/4 + (E_0 - E_s)j$  处有效质量为电子平均有效质量. 为了定量比较, 表1中给出共振缺陷态和隧道效应分别存在时对  $E_0, E_F$  的影响,  $R = 0$  表示不存在共振缺陷态,  $R = 1$  为存在共振缺陷态;  $T = 0$  表示不存在隧道效应,  $T = 1$  为存在隧道效应. 可见共振缺陷态使  $E_0$  增大, 隧道效应则使  $E_0$  减小. 反型层电子浓度越大, 二者影响也越大, 这与 Sizmann 等人<sup>[3]</sup>的结论是一致的.

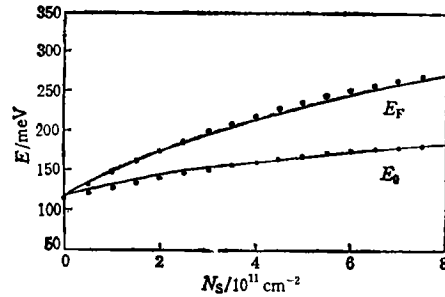


图3  $T = 4.2K, x = 0.21$  样品 ( $N_{AD} = 1.87 \times 10^{17} cm^{-3}$ )  $E_0, E_F$  与  $N_s$  关系曲线  
实线为考虑隧道效应的计算结果; 圆点为实验数据, 取自文献[11, 12]

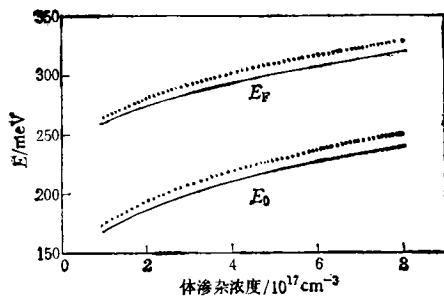


图 4  $N_A \approx 8 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$  时  $E_0$  与体掺杂浓度的变化关系 ( $T = 4.2\text{K}$ , 样品组分  $x = 0.21$ ) 实线为考虑 Zener 效应;虚线为不考虑 Zener 效应

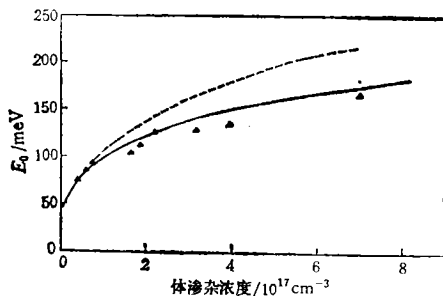


图 5  $N_A \approx 0$  时  $E_0$  随体掺杂浓度的变化关系 ( $T = 4.2\text{K}$ , 样品组分  $x = 0.21$ ) 不考虑隧道效应

表 1 不同条件下  $E_0$ ,  $E_F$  的计算结果

|         | $N_A/\text{cm}^{-2}$ | $E_0/\text{meV}$ | $E_F/\text{meV}$ |
|---------|----------------------|------------------|------------------|
| $T = 0$ | 0                    | 114.02           | 114.00           |
| $R = 0$ | $8 \times 10^{11}$   | 186.03           | 273.90           |
| $T = 1$ | 0                    | 114.05           | 114.00           |
| $R = 0$ | $8 \times 10^{11}$   | 178.87           | 267.66           |
| $T = 0$ | 0                    | 117.20           | 117.00           |
| $R = 1$ | $8 \times 10^{11}$   | 190.96           | 277.91           |
| $T = 1$ | 0                    | 117.24           | 117.00           |
| $R = 1$ | $8 \times 10^{11}$   | 184.35           | 272.00           |

还分两种情况计算了  $x = 0.21$  样品的  $E_0$  随体掺杂浓度的变化关系: 1)  $N_A \approx 8 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ , 见图 4. 实线考虑了 Zener 效应, 虚线没有考虑 Zener 效应; 2)  $N_A \approx 0$ , 见图 5, 未考虑隧道效应. 尽管此时样品的掺杂可能较高, 但因为隧穿到价带的电子较少, 故可以忽略对能带弯曲的贡献. 计算参数取自文献 [11, 12]:  $T = 4.2\text{K}$ ,  $N_R = 35\%N_A$ ,  $E_R = 45\text{meV}$ .  $\epsilon_s = 17$ , 图中点是从实验获得的结果<sup>[3]</sup>.

在图 4 中, 随着掺杂浓度的增大, 隧道效应对  $E_0$  的影响也增大. 这是因为 MIS 结构反型时反型层较薄, 而掺杂浓度的增高将使材料处于强简并状态, 故基态能级  $E_0$  易位于价带能级以下而发生隧道效应. 在图 5 中, 本文计算结果(实线)较多带模型<sup>[13]</sup>(虚线)更符合实验数据. 多带模型与实验偏差的一个原因是由于没有计及 Zener 效应, Sizmann 等人<sup>[3]</sup>认为考虑该效应后  $E_0$  将略有降低. 多带模型偏差的另一主要原因可能是没有考虑子能带波函数的平均效应及由此决定的子能带电子有效质量.

## 四、结 论

根据 Stern 模型, 通过引入波函数分布参数和子能带电子平均有效质量, 并考虑 Zener 隧穿效应、共振缺陷态以及屏蔽长度内载流子衰减等影响因素, 导出了较易计算的

子能带结构自洽公式, 结果与 p-HgCdTe MIS 结构的实验数据符合较好。理论计算表明共振缺陷态使子能带基态能量增大, Zener 效应则使子能带基态能量减小; 随反型层电子浓度和掺杂浓度的增加, 二者对能带结构的影响也相应增大。

- [1] 褚君浩, R. Sizmann, F. Koch, 中国科学 (A 辑), (5)(1990), 515.
- [2] J. H. Chu, *Phys. Rev.*, **B44** (1991), 1717.
- [3] R. Sizmann, J. Chu *et al.*, *Semicond. Sci. Technol.*, **5**(1990), S111.
- [4] Frank Stern, *Phys. Rev.*, **B5** (1972), 4891.
- [5] I. Nachev, *Semicond. Sci. Technol.*, **3** (1988), 29.
- [6] F. F. Fang and W. E. Howard, *Phys. Rev. Lett.*, **16** (1966), 797.
- [7] W. Brenig and H. Kasai, *Z. Phys.*, **B54**(1982), 191.
- [8] W. Zawadzki, *J. Phys. C*, **16** (1983), 229.
- [9] A. Ziegler and U. Rossler, *Solid State Commun.*, **65** (1988), 805.
- [10] 褚君浩, 红外研究, **4**(1985), 439.
- [11] 褚君浩, 红外研究, **8**(1989), 327.
- [12] W. Scoot, *J. Appl. Phys.*, **47** (1976), 1408.
- [13] F. Malcher, I. Nachev *et al.*, *Z. Phys.*, **B68** (1987), 437.

## GROUND STATE ENERGY OF THE ELECTRON SUBBAND IN p-TYPE HgCdTe INVERSION LAYER

LIU KUN    CHU JUN-HAO    LI BIAO    TANG DING-YUAN

*State Key Laboratory of Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical  
Physics, Academia Sinica, Shanghai 200083*

(Received 13 April 1993)

### ABSTRACT

By using a modified self-consistent variation method, we have calculated the subband structures of n-type inversion layer in p-type HgCdTe MIS (metal-insulator-semiconductor) devices, obtained the ground subband energy  $E_0$  and its dependence on both the doping concentration in bulk HgCdTe and the surface electron concentration in the inversion layer. In the treatment, the influence of non-parabolic band structure due to the interaction between the conduction band and the valence band, the Zener tunneling, the resonant states and the screening effect of the surface electric field have been considered. A simple and useful formula for calculating ground state energy  $E_0$  has been presented. The calculated results show good agreement with experimental data.

**PACC:** 7128; 7340Q