

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 禁带以上的本征光吸收

李 标 褚君浩 常 勇 桂永胜 汤定元

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家实验室, 上海 200083)

(1995年1月24日收到; 1995年8月8日收到修改稿)

讨论了 HgCdTe 三元半导体在能量大于禁带宽度范围内的本征吸收光谱. 经过分析比较实验数据, Kane 理论结果以及几种经验公式, 指出 Anderson 从 Kane 模型获得的理论公式及褚君浩等从实验结果得出的经验公式, 最符合 HgCdTe 禁带以上本征光吸收行为. 文中还就外延薄膜样品的本征吸收进行了讨论.

PACC: 0765G; 7280E

1 引 言

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 是一种优良的红外探测器材料, 曾有一系列文章研究其红外光吸收的规律^[1-10]. 因为从光吸收谱中人们不仅能够获得化合物半导体带带跃迁及晶格无序等方面信息, 而且还可以就体单晶与外延材料特性的异同进行比较.

完整的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 吸收光谱包括本征吸收区及 Urbach 吸收带尾. Urbach 带尾的形成可能是由带尾态, 内电场, 电子空穴相互作用, 无序效应等多种效应所致, 而本征吸收区则是由价带电子受光激发跃迁到导带形成的较为平坦的吸收区域. 此时可用 Kane 能带结构来解释光吸收特性, 故又称 Kane 区. 这两个区域均有很多的实验研究, 产生了大量的实验数据^[5,6]. 由此人们总结出了一些经验公式来描述不同光谱区域中 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 光吸收特性. 对于能量小于 E_g 的 Urbach 带尾区, Finkman 及褚君浩等分别认为它符合指数形式的吸收规律; 对于能量大于 E_g 的本征吸收区, 传统以为其吸收系数应与能量的平方根项成正比, 我们最近的工作则表明它仍然符合指数吸收规律, 只是指数项与能量的平方根成正比^[7]. 本文根据 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 本征吸收光谱的实验数据, 结合 Kane 理论, 对不同的经验公式进行了比较.

2 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的本征吸收光谱

目前, 最完整的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 本征吸收光谱是由褚君浩等测得的^[4,6]. 为了获得完整的吸收光谱, 必须使样品很薄且光谱仪的分辨率要高. 实验采用半熔法生长的 HgCdTe 单晶样品, 其组分从 0.17 到 0.443. 样品用胶粘接在宝石片衬底上, 用研磨、抛光和腐蚀的办法减薄到小于 $10\mu\text{m}$. 用 PE983 红外分光光度计(其测试的透过率精度可达 10^{-4}), 测量了从 4.2—300K 范围内 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品的透射曲线, 由透过率推出吸收系数. 这

样测得的吸收光谱, 不仅吸收曲线转弯后的长度长, 而且覆盖了主要的温度与组分区域, 故有利于研究 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的本征吸收规律.

3 本征吸收系数的表示

研究表明, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的本征吸收边符合 Urbach 经验规则^[6]:

$$\alpha = \alpha_0 \exp[\delta(E - E_0)/kT], \quad (1)$$

其中

$$\ln \alpha_0 = -18.5 + 45.68x,$$

$$E_0 = -0.355 + 1.77x,$$

$$\delta/kT = (\ln \alpha_g - \ln \alpha_0)/(E_g - E_0),$$

$$\alpha_g = -65 + 1.88T + (8694 - 10.31T)x,$$

$$E_g(x, T) = -0.295 + 1.87x - 0.28x^2 + (6 - 14x + 3x^2)(10^{-4})T + 0.35x^4,$$

式中参数 α_g 为能量等于禁带宽度 E_g 时的吸收系数. 当 $E < E_g$ 时, $\alpha < \alpha_g$, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的吸收可以用 Urbach 规律表示.

能量大于 E_g 时的吸收系数与入射光频率的相应关系可用光跃迁理论及 Kane 模型计算^[4, 11, 12]. 然而, 具体计算过程比较复杂. Anderson 根据 Kane 模型推导了在本征吸收区 α 与 E_g 的关系^[8]. 根据他的观点, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 吸收边以上的光吸收包括重空穴带和轻空穴带跃迁两部分的贡献, 用公式表示, 即

$$\alpha_{lh} = \frac{1 + 2(E_g/\hbar\omega)^2 \sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_g^2}}{137\sqrt{6}\sqrt{\epsilon_\infty}4P} BM_{lh}, \quad (2)$$

$$\alpha_{hh} = \frac{1}{137\sqrt{\epsilon_\infty}} \frac{E_g k\omega}{2\hbar\omega} \left(\sqrt{1 + \frac{8P^2 k_\omega^2}{3E_g^2}} + 1 \right) BM_{hh} \\ \div \left[1 + \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 E_g}{m_0 P^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_k \hbar} \right) \times \sqrt{1 + \frac{8P^2 k_\omega^2}{3E_g^2}} \right], \quad (3)$$

其中 BM_{lh} 与 BM_{hh} 分别为轻、重空穴带的 Berstein-Moss 因子. 总的吸收系数为

$$\alpha = \alpha_{lh} + \alpha_{hh}. \quad (4)$$

对具有抛物能带的半导体材料, 其本征光吸收系数与光子能量的平方根成正比^[13]. 人们由此认为这种平方根规律对于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料也适用^[9, 10]. Schacham 和 Finkman 认为在 Kane 区域的吸收系数与能量之间的关系可表为^[9]: $\alpha = \beta(E - E_g)^{1/2}$, 其中 $\beta = 2.109 \times 10^5 [(1+x)/(81.9+T)]^{1/2}$. 然而, 他们的实验中只有吸收边的数据, 没有测到本征吸收带, 因而无法将该式与实验结果比较. 我们发现由该式计算得到的吸收系数远比文献[6]的测量值小, 且计算结果在 $E = E_g$ 点不连续. Sharma 根据褚君浩的实验数据^[6], 将平方根规律表示为^[10]

$$\alpha_g = \beta(E - E'_g)^{1/2}, \quad (5)$$

其中

$$\beta = \alpha_g / (E_g - E'_g),$$

$$E'_g = E_g - \frac{(E_g - E_0)}{2 \ln(\alpha_g / \alpha_0)},$$

式中 β 为拟合参数, E'_g 为不考虑能带扭曲时的禁带宽度, 这样处理可以保证(5)式与(1)式在 $E = E_g$ 处连续. 我们在文献[7]中指出, 用一种指数规律来描述 α 与 E_g 的关系将与实验数据符合得更好, 即

$$\alpha = \alpha_g \exp[\beta(E - E_g)]^{1/2}, \quad (6)$$

其中参数 β 与组分 x 及温度 T 有关, $T = 300\text{K}$ 时, $\beta = 24 - 18x$, $T = 77\text{K}$ 时, $\beta = 5.4 + 11x$. 假设 β 与 x 及 T 间的关系为线性的, 则用内插法可得下式:

$$\beta(T, x) = -1 + 0.083T + (21 - 0.13T)x.$$

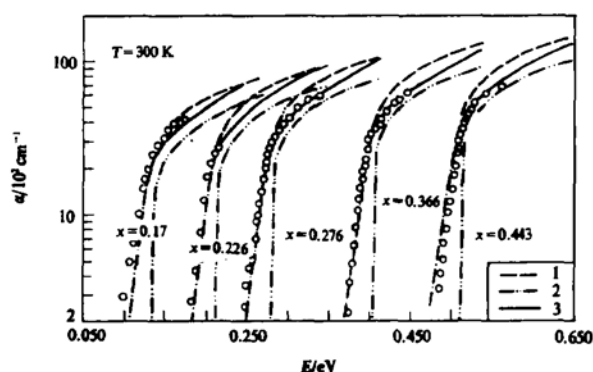
(6)式的意义是, 当 $E = E_g$ 时, $\alpha = \alpha_g$, 即本征吸收区与带尾区在 E_g 点衔接. 当 $E > E_g$ 时, 吸收系数将随能量的增加而按指数规律上升, 其指数项与能量的平方根成正比. 将(6)式展开可以发现其一次项正比于 $(E - E_g)^{1/2}$, 说明在能量大于 $E > E_g$ 不远的范围内, (6)式符合(5)式反映的 α 与 E 间的平方根规律.

4 结果与讨论

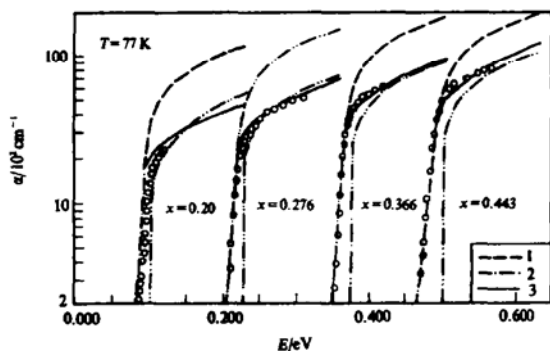
图 1(a), (b) 为组分 $x = 0.17 - 0.443$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品在 300K 及 77K 的本征吸收光谱. 图中圆点为褚君浩等的测试数据^[4,6], 曲线 1, 2, 3 分别是由(4), (5)和(6)式计算所得的本征吸收系数, 曲线 4 为由(1)式计算得的 Urbach 吸收边. 在用(4)式计算 Anderson 模型时, 参量的选取为: 动量矩阵元 $P = 8 \times 10^{-8} \text{eV} \cdot \text{cm}$, 重空穴质量 $m_{hh} = 0.55 m_0$, 高频介电常数 $\epsilon_\infty = 15.2 - 15.5x + 13.76x^2 - 6.32x^3$, Burstein-Moss 因子 BM_{lh} 和 BM_{hh} 均取为 1 (即非简并情况). 在我们的实验中, 除了 $x = 0.17$ 的样品在室温下的情况外, 这一假设均能成立.

由图 1 可知, 用(5)和(6)式计算得到的 Kane 平台与用(1)式计算得的 Urbach 带尾衔接得很好, 而用(4)式计算得的曲线在接近 E_g 时迅速下降, 这是因为 Anderson 模型中没有考虑带尾效应. 室温时, 由(4), (5)和(6)式计算得到的本征吸收系数均与实验值符合, 但褚君浩等的经验公式与实验结果更接近. 在 77K, 由 Anderson 模型及褚君浩等的经验公式计算的本征吸收系数依然符合实验值, 但 Sharma 的平方根规律却与测试结果产生了误差. 因为吸收系数与能量间的平方根关系只能解释抛物带半导体的本征吸收行为, 而不适用于像 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 这样的非抛物能带. 在 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 中, 随着组分 x 的减小及温度的降低, 能带的非抛物性增加, 导致本征吸收与平方根规律的偏差变大.

我们还对不同组分的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品作了变温测量, 结果如图 2 所示. 图 2(a), (b), (c), (d) 分别对应与 $x = 0.20, 0.276, 0.33, 0.443$ 四个不同的组分. 其中圆点为实验数据^[4,6], 曲线 1, 2 和 3 分别是由(4), (5)和(6)式计算所得的本征吸收系数. 由图可知, Anderson 模型及褚君浩等的经验公式可以很好地解释不同温度, 不同组分下 Hg_{1-x}

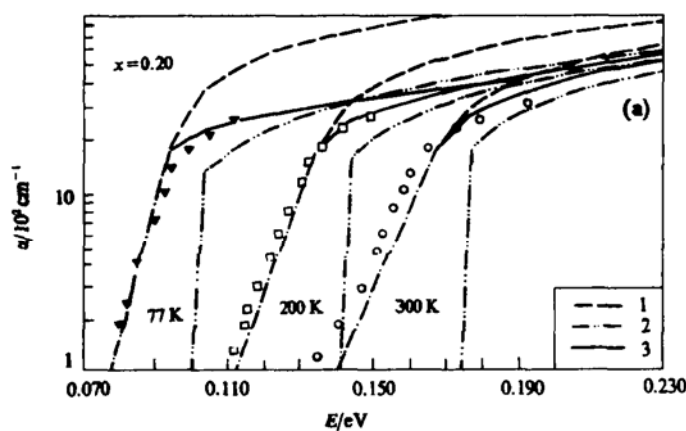


(a)



(b)

图1 组分 $x=0.17-0.443$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品在 300K (a) 及 77K (b) 的本征吸收光谱. 图中圆点为褚君浩等的测试数据^[4,6], 曲线 1, 2, 3 分别是由 (4), (5), (6) 式计算所得的本征吸收系数, 曲线 4 为由 (1) 式计算得的 Urbach 吸收边



Cd_xTe 的本征吸收光谱, 二者之间也符合得很好; 而 Sharma 的经验公式却与测试结果有误差. 亦即, 随着能量的增大, 由 (5) 式计算的本征吸收系数的上升趋势比用 (4), (6) 式计算的结果大, 其随温度的变化关系也与实验数据不符, 特别是在低温及小组分的情况下, 这种差异表现得尤为明显, 因为能带的非抛物性随着组分 x 的减小及温度的降低而增加, 从数学上理解, 只有当入射光子能量 E 与带宽 E_g 相差不大时, $(E - E_g)^{1/2}$ 项较小, (5) 式才近似与 (6) 式相等, 这相应与本征吸收曲线的起始部分. 随着温度的降低及组分 x 的减小, E_g 将迅速减小, 这一近似就很难满足. 传统采用 (5) 式的原因是因为他们测量用的样品较厚, 测到的吸收谱在 Kane 区的数据点较少, 只能观察到本征吸收曲线的起始部分. 我们采用体材料薄膜样品的测量表明, α 与 E 之间的指数依赖关系比平方根关系更能说明 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的本征吸收规律.

如所周知, 用 MBE, MOCVD, LPE 等外延手段可以很方便地获得薄膜材料. 但由于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延薄膜普遍存在着纵向组分的不均匀性, 其吸收带尾被展宽, 无法获得理想的本征吸收光谱. 这里我们考虑外延薄膜在禁带上方的吸收情况. 图 3 组分为 0.276 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ LPE 薄膜样品

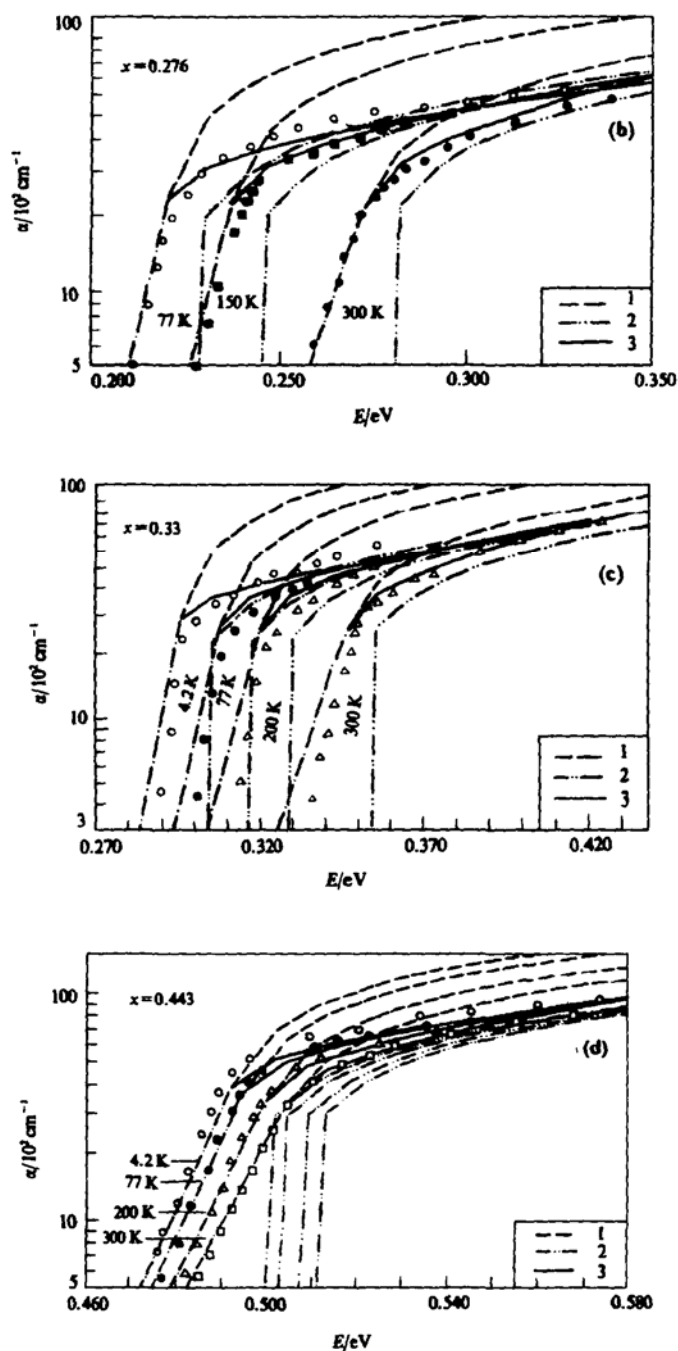


图2 组分 $x=0.20$ (a), 0.276 (b), 0.33 (c), 0.443 (d) 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品在不同温度的本征吸收光谱 图中圆点为实验数据^[4,6], 曲线 1, 2 和 3 分别是由(4), (5)和(6)式计算所得的本征吸收系数

在室温的吸收曲线. 图中实验点取自 Mollmann 等的测试数据^[14], E_g 下方的虚线是用

(1)式计算得的 Urbach 吸收带尾, 曲线 1, 2 则是用(4), (6)式计算所得的本征吸收光谱. 由图可知, 在 Urbach 吸收区, 理论曲线与实验点间存在着误差, 实际的带尾更宽, 这是由样品的纵向组分不均匀性造成的^[8]. 在 Kane 区, Anderson 模型及褚君浩等的经验公式则与实验数据符合得很好. 这一结果表明, (6)式反映的吸收系数与能量间的指数规律可用以说明 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 液相外延薄膜在 Kane 区的本征光吸收.

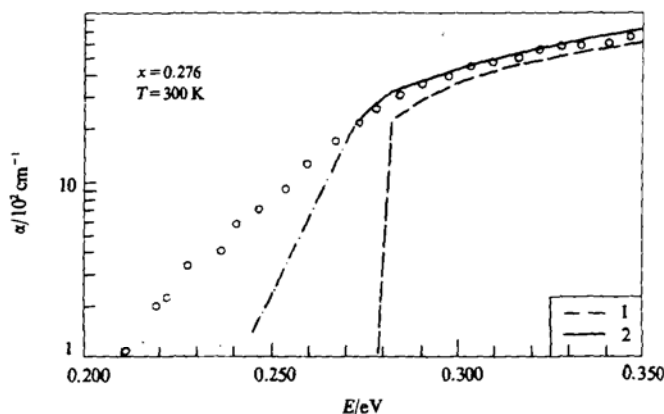


图3 $\text{Hg}_{0.724}\text{Cd}_{0.276}\text{Te}$ LPE 薄膜样品在室温的吸收曲线, 样品厚度为 $3.5\mu\text{m}$. 实验点取自 Mollmann 等的测试数据^[14], E_g 下方的虚线是用(1)式计算得的 Urbach 吸收带尾, 曲线 1, 2 是用(4), (6)式计算所得的本征吸收光谱

5 小 结

本文根据 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 本征吸收光谱的实验曲线, 讨论了典型的描述 Kane 区本征吸收系数的经验公式. 结果表明, Anderson 模型及褚君浩等的经验公式可以很好地解释组分从 0.17 到 0.443, 温度从 4.2—300K 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 本征吸收行为, 但用 Anderson 模型计算比较复杂, 且其不能说明 E_g 附近的吸收, 因而计算曲线不能与吸收带尾衔接. 吸收系数与能量间的平方根规律则与实验结果符合得不好, 特别是它不能解释在低温及小组分的情况下 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 本征吸收光谱. 褚君浩等的经验公式还可以用于描述外延薄膜在 Kane 区域的本征吸收.

- [1] J. H. Chu, S. Q. Xu, D. Y. Tang, *Appl. Phys. Lett.*, **43**(1983), 1064.
- [2] C. A. Hougen, *J. Appl. Phys.*, **66**(1989), 3763.
- [3] K. H. Herrmann, M. Happ, H. Kissel, K.-P. Mollmann *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **73**(1993), 3486.
- [4] J. H. Chu, Z. Y. Mi, D. Y. Tang, *Infrared Phys.*, **32**(1991), 195-211.
- [5] E. Finkman, S. E. Schacham, *J. Appl. Phys.*, **56**(1984), 2896.
- [6] J. H. Chu, Z. Y. Mi, D. Y. Tang, *J. Appl. Phys.*, **71**(8)(1992), 3955.
- [7] J. H. Chu, B. Li, K. Liu, D. Y. Tang, *J. Appl. Phys.*, **75**(1994), 1234.
- [8] W. W. Anderson, *Infrared Phys.*, **20**(1980), 363.

- [9] S. E. Schacham, E. Finkman, *J. Appl. Phys.*, **57**(1985), 2001.
- [10] R. K. Sharma, D. Verma, B. B. Sharma, *Infrared Phys. Technol.*, **35**(1994), 673.
- [11] E. Kane, *J. Phys. Chem. Solids*, **1**(1957), 249.
- [12] J. Chu, *Chin. J. IR. Res.*, **2**(1983), 89.
- [13] T. S. Moss, G. J. Burrell, B. Ellis, *Semiconductor Opto-Electronic*(Butterworths, London, 1973), p. 71.
- [14] K-P Mollmann, H. Kissel, *Semicond. Sci. Technol.*, **6**(1991), 1167.

INTRINSIC ABSORPTION OF $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

LI BIAO CHU JUN-HAO CHANG YONG GUI YONG-SHENG TANG DING-YUAN

(National Laboratory for Infrared Physics Shanghai Institute
of Technical Physics, Academia Sinica, Shanghai 200083)

(Received 24 January 1995; revised manuscript received 8 August 1995)

ABSTRACT

The intrinsic absorption spectra of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ semiconductor with energies above the band gap are presented by analyzing experimental results, Kane theory and some empirical laws. It is found that Anderson's theoretical expression derived from the Kane model and Chu et al's empirical rule obtained from the measured data agree well with the intrinsic optical absorption behaviour of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ bulk thin films. Moreover, the intrinsic absorption of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ epitaxial layer is discussed.

PACC: 0765G; 7280E