

## IV–VI族化合物半导体异质结二维电子气研究进展

马嵩松 舒天宇 朱家旗 李锴 吴惠桢

### Recent progress on IV–VI compound semiconductor heterojunction two-dimensional electron gas

Ma Song-Song Shu Tian-Yu Zhu Jia-Qi Li Kai Wu Hui-Zhen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 166801 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20191074

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191074>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

二维半导体过渡金属硫化物的逻辑集成器件

Logical integration device for two-dimensional semiconductor transition metal sulfide

物理学报. 2017, 66(21): 218503 <https://doi.org/10.7498/aps.66.218503>

InAlN/GaN异质结二维电子气波函数的变分法研究

Variational study of the 2DEG wave function in InAlN/GaN heterostructures

物理学报. 2018, 67(2): 027303 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171827>

二维极化激元学近场研究进展

Recent progress of near-field studies of two-dimensional polaritonics

物理学报. 2019, 68(11): 110701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190341>

二维有机拓扑绝缘体的研究进展

Research progress of two-dimensional organic topological insulators

物理学报. 2018, 67(23): 238101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181711>

二维三组元声子晶体中的半狄拉克点及奇异特性

Semi-Dirac cone and singular features of two-dimensional three-component phononic crystals

物理学报. 2016, 65(4): 044301 <https://doi.org/10.7498/aps.65.044301>

二维材料中的氢隧穿研究进展

Research progress of hydrogen tunneling in two-dimensional materials

物理学报. 2017, 66(5): 056601 <https://doi.org/10.7498/aps.66.056601>

专题：纪念黄昆先生诞辰百年

IV-VI族化合物半导体异质结二维  
电子气研究进展\*

马嵩松 舒天宇 朱家旗 李锴 吴惠桢†

(浙江大学物理学系, 硅材料国家重点实验室, 杭州 310027)

(2019年7月15日收到; 2019年8月12日收到修改稿)

半导体异质结在探索新奇物理和发展器件应用等方面一直发挥着不可替代的作用. 得益于其特有的能带性质, 相对较窄的带隙和足够大的自旋轨道耦合相互作用, IV-VI族化合物半导体异质结不仅在红外器件应用方面具有重要的研究价值, 而且在拓扑绝缘体和自旋电子学等前沿领域引起了广泛的关注. 尤为重要的是, 在以 CdTe/PbTe 为代表的 IV-VI 族化合物半导体异质结界面上发现了高浓度、高迁移率的二维电子气. 该电子气的形成归因于 IV-VI 族化合物半导体异质结独特的扭转界面. 进一步的研究表明, 该二维电子气体系不仅对红外辐射有明显响应, 而且它还表现出狄拉克费米子的性质. 本文系统综述了近年来 IV-VI 族化合物半导体异质结二维电子气研究取得的主要进展. 首先对 IV-VI 族化合物半导体异质结扭转界面二维电子气的形成机理进行了介绍; 然后讨论该二维电子气在低温强磁场下的输运性质, 并分析了它的拓扑性质以及在自旋器件方面的应用前景; 最后, 展示了基于该二维电子气研制的中红外光电探测器.

关键词: IV-VI 族化合物半导体异质结, 二维电子气, 狄拉克费米子, 红外探测器

PACS: 68.35.bj, 71.10.Ca, 68.65.Fg, 73.40.-c

DOI: 10.7498/aps.68.20191074

## 1 引言

众所周知, 在半导体物理的发展历史上, 异质结界面性质的研究带动了一大批器件的发展, 极大地促进了人类社会文明的进程, 例如, 点接触晶体管的发明开启了信息时代<sup>[1,2]</sup>, 基于 InGaN/AlGaIn 异质结的高亮度蓝光发光二极管 (light-emitting diode, LED) 为人类带来了节能明亮的光源<sup>[3]</sup>. 同时, 人们在探索不同界面的过程中, 揭示了很多新奇的物理现象, 如在 Si/SiO<sub>2</sub> 界面发现的量子霍尔效应 (quantum Hall effect, QHE)<sup>[4]</sup>, 在 CdTe/HgTe 量子阱中实现的量子自旋霍尔效应<sup>[5]</sup>等. 直到现在, 异质结界面还在持续不断地为我们带来令人兴奋的新奇物理, 比如在转角石墨烯超晶格体系中发

现的非常规超导<sup>[6]</sup>就引起了人们广泛的关注. IV-VI 族化合物半导体已经有数十年的研究历史. 20 世纪 30 年代前后, 出于军事上的需求, 德国军方开始研究 PbS 红外探测器<sup>[7]</sup>. 由于 IV-VI 族化合物半导体具有较窄的带隙, 类似的研究很快扩展到 PbSe 和 PbTe 等材料上<sup>[7]</sup>. 在随后的几十年间, 科研人员逐渐掌握了此类材料的一些基本性质, 并且可以通过可控的手段, 比如分子束外延技术 (molecular beam epitaxy, MBE), 获得高质量的 IV-VI 族化合物半导体薄膜<sup>[8]</sup>. 在此基础上, 一些关于 IV-VI 族化合物半导体异质结的研究逐渐开展起来, 包括对 PbTe/Pb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te 体系红外光响应的细致研究<sup>[9]</sup>, 基于 PbTe/Pb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te 体系的中红外激光器<sup>[10]</sup>, 以及 IV-VI 族化合物半导体异质结增强的热电效应<sup>[11,12]</sup>. 进入 21 世纪以来, 人们更多地关

\* 国家自然科学基金 (批准号: U1737109) 和中央高校基本科研业务费专项资金资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hzwu@zju.edu.cn

注基于IV-VI族化合物半导体的低维体系的性质, 其中尤其以 Koike 等<sup>[13]</sup>在2003年通过MBE外延生长实现的在[100]取向的GaAs衬底上以CdTe为缓冲层的PbTe/CdTe异质结最为特别, 因为它是一种晶格结构失配的异质结构, 具有十分独特的界面性质. 其中PbTe属于氯化钠型晶体, 而CdTe属于闪锌矿晶体, 两种截然不同的晶体结构保证了界面不易形成固溶, 从而有利于获得极为整齐的异质结界面. 更有趣的是, [100]取向的CdTe/PbTe/CdTe通过退火形成了嵌在CdTe基底中的PbTe量子点, 该量子点表现出了明显的室温中红外荧光增强, 这个有趣的现象引发了人们对该体系的异质界面结构和电子性质进行了大量的理论和实验研究, 结果表明这种量子点是由(110), (100), (111)三种界面包围的高度对称的菱方八面体, 且界面处与CdTe基底均是完全成键的<sup>[14]</sup>.

上述关于晶格结构失配的异质结的研究工作启发了我们进行IV-VI化合物半导体异质结的进行更加细致深入的研究. 前人的研究都侧重于[100]取向的衬底上外延生长的PbTe/CdTe体系, 包括PbTe/CdTe单量子阱和内嵌于CdTe基底的PbTe量子点. 在体材料PbTe中, 直接带隙位于布里渊区L点, 且L点的四个能谷是等价的. 但是, 只有[111]取向的PbTe低维结构具有纵向能谷, 其余的斜能谷性质均可由纵向能谷通过坐标变换得到<sup>[9,15]</sup>. 因此, 基于[111]取向的PbTe低维结构的优势, 我们提出了构建[111]取向CdTe/PbTe异质结的想法. 并且, 由于氯化钠结构的PbTe在[111]方向上晶面间距是相等的, 而闪锌矿结构的CdTe在[111]方向上晶面间距是宽窄交替的, 这与[100]取向的异质结截然不同. 本文主要回顾了近十年间我们在发展CdTe/PbTe(111)异质结方面取得的成果. 首先, 我们通过MBE外延获得了高质量的CdTe/PbTe(111)异质结, 并且通过X射线光电子能谱(X-ray photoelectron spectroscopy, XPS)研究了该异质结界面的带阶情况<sup>[16]</sup>. 我们还在CdTe/PbTe(111)异质结上观察到了显著的PbTe荧光增强, 而异质结的界面效应在其中起到了关键作用<sup>[17]</sup>. 同时, 在CdTe/PbTe(111)异质结界面上发现了高电子浓度、高电子迁移率的2DEG, 为了解该2DEG的形成机制, 我们结合第一性原理计算的结果提出了CdTe/PbTe(111)扭转界面的模型<sup>[18,19]</sup>. 进一步的研究表明, 界面上高浓度

的2DEG能够有效屏蔽界面附近晶格振动的极化效应, 导致极性振动模式强度的极大抑制, 这种声子屏蔽效应在PbTe相关的热电领域有很好的应用前景<sup>[20]</sup>. 更加有趣的是, 量子振荡的结果表明, CdTe/PbTe(111)界面的2DEG具有狄拉克电子系统的性质, 它有可能成为拓扑绝缘体<sup>[21]</sup>. 利用离子液体作为栅极, 我们可以有效地调控界面沟道上的2DEG电子浓度, 这为研制基于CdTe/PbTe(111)异质结的高电子迁移率晶体管(high electron mobility transistor, HEMT)奠定了基础<sup>[22]</sup>. 近期, 我们研制了基于CdTe/PbTe(111)异质结2DEG的高速红外光子型探测器. 以上这些结果表明, CdTe/PbTe(111)异质结为代表的IV-VI族化合物半导体异质结具有独特的性质, 它不仅成为探索新奇物理的平台, 而且具有广阔的应用前景.

## 2 CdTe/PbTe(111) 扭转界面异质结

### 2.1 CdTe/PbTe(111) 异质结的生长和结构表征

借助于自主发展的碲化物MBE系统, 我们可以生长高质量的CdTe/PbTe(111)样品. 首先在新解理的BaF<sub>2</sub>(111)衬底上外延一层1 μm厚的PbTe薄膜, 接着在其上覆盖一层100 nm厚的CdTe薄膜. 其中PbTe和CdTe都没有经过任何故意掺杂. 在样品生长过程中, 通过原位反射高能电子衍射(reflection high-energy electron diffraction, RHEED)进行实时监测. 明亮锐利的RHEED衍射条纹表明不仅在BaF<sub>2</sub>(111)衬底上外延的高质量PbTe表面很平整, 而且后续在PbTe薄膜表面继续生长的CdTe覆盖层也非常平整, 如图1(a)和图1(b)所示, 说明我们获得的CdTe/PbTe(111)异质结的界面是非常平整的. CdTe/PbTe(111)异质结界面的高分辨率相差矫正的扫描透射电子显微镜(aberration-corrected scanning transmission electron microscope, AC-STEM)图像清晰地展示了界面附近的原子排布情况和整齐锐利的界面, 表明我们获得的异质结具有完美的界面, 如图1(c)所示. CdTe/PbTe(111)异质结的成功生长, 很大程度上归因于这两种材料晶格常数很接近, 0 K时分别为0.6422 nm和0.6647 nm, 晶格失配率小于1%<sup>[19]</sup>. 这对于获得整齐的界面十分有益. 除了BaF<sub>2</sub>衬底, 我们还曾经成功在Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te衬底以及

云母衬底上成功生长过 CdTe/PbTe(111) 异质结, 衬底的选取非常灵活, 这就为器件应用提供了方便. 这里需要注意到, 图 1(b) 中反映的重构现象是由于两种不同晶格结构 (氯化钠型和闪锌矿型) 在界面附近相互竞争的结果, 在下一节会用理论模拟的结果来详细解释这个重构.

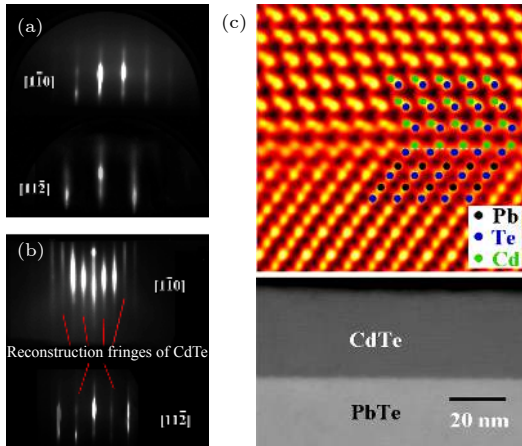


图 1 (a) 生长在  $\text{BaF}_2(111)$  衬底上的 PbTe 薄膜表面的 RHEED 衍射图样; (b) 在 PbTe 薄膜表面继续生长的 CdTe 外延层的 RHEED 图样, 图中标注的方向为电子束掠入射的方向; (c) CdTe/PbTe 异质结界面的相差矫正扫描透射电子显微镜图像, 清晰地反映了界面附近的原子排布, 下方的内插图是 CdTe/PbTe 异质结低倍透射电镜图像<sup>[19,21]</sup>

Fig. 1. The RHEED patterns of (a) PbTe film grown on  $\text{BaF}_2(111)$  substrate and (b) CdTe capping layer grown on the PbTe film surface; (c) aberration-corrected scanning transmission electron microscope (AC-STEM) image of the CdTe/PbTe heterojunction, showing the arrangement of atoms near the interface. The inset below is the low-magnification TEM image of the heterojunction<sup>[19,21]</sup>.

## 2.2 CdTe/PbTe(111) 异质结扭转界面的第一性原理研究

为了理解 CdTe/PbTe(111) 异质结的界面结构, 我们通过缀加外电场修正的方法通过密度泛函理论模拟了在 PbTe(111) 上外延生长 CdTe 的物理过程<sup>[19]</sup>. 结果表明, 在逐层外延生长方式下会形成一种亚稳态的界面结构, 外延层会相对衬底 [111] 轴旋转  $180^\circ$ , 我们称之为扭转界面. 这个特殊的扭转界面的形成会导致界面附近产生不同的电子结构, 从而带来一些新奇的物理现象.

如图 2(a) 所示, 通过退火形成的内嵌于 CdTe 基底中的 PbTe 量子点形成的 CdTe/PbTe(111) 界面上, PbTe 的晶面与 CdTe 的相应晶面是相互平行的. 以图中白色虚线标示出的 (100) 晶面为例, 可以看出, 两者平行, 说明两层晶体之间没有相对

转动. 但是, 当 CdTe 在 PbTe(111) 表面以逐层生长的模式生长时, 情况与 PbTe 量子点不同. 我们在第一性原理模拟的模型中, 通过在 PbTe(111) 表面依次添加 Cd 和 Te 原子对生长过程进行模拟, 结果表明无论 PbTe 表面是 Pb 原子终止还是 Te 原子终止, 界面总会形成图 2(b) 中所示的扭转界面. 所谓扭转界面, 是指外延的 CdTe 会以 [111] 方向为轴转动一个角度, 从而使得 CdTe 和 PbTe 的相应晶面不再平行, 如图 2(b) 中白色虚线标示出的两个 (100) 晶面就不再平行, 而是存在一定夹角 ( $2\arccos\sqrt{2/3}$ ). 这一点很容易理解, 开始生长 CdTe 时, 如果 PbTe 是 Pb 原子终止的表面, 那么其上就会首先覆盖一层 Te 原子, 这是因为 Pb 和 Cd 无法直接形成化学键. Te 原子在界面上与 Pb 原子形成离子键从而延续了氯化钠晶格结构. 由于 PbTe(111) 面的面间距相等, 所以被碲化的 Pb 终止面等价于一个 Te 终止面. 然后 Cd 原子会与 Te 原子层以闪锌矿晶体结构进行成键, 因此无论是在 Pb 终止面还是 Te 终止面上外延 CdTe, 最终结果应该是无差别的. 相比于图 2(a) 中的非扭转结构, 扭转结构可以尽可能地保持界面处 CdTe 闪锌矿和 PbTe 氯化钠型晶格结构以及体材料的成键类型. 例如, 在图 2(a) 中, PbTe(CdTe) 由周期性的矩形 (六边形) 堆垛而成, 而在界面处矩形 (六边形) 的形状很不相同, 边由 Cd-Te 键和 Pb-Te 键共同围成. 在图 2(b) 的扭转结构中, 界面处基本保持了矩形 (六边形) 在体材料内的形状, 但是非扭转结构使它们严重扭曲. 从这一点上可以看出, 扭转结构在外延过程中比非扭转结构更容易形成. 我们还计算了这两种界面结构的总能量和束缚能, 结果表明, 非扭转结构相对于扭转结构是能量优先选择的态. 这说明退火形成的内嵌于 CdTe 基底的 PbTe 量子点的非扭转界面结构是能量优先选择的平衡相, 而 CdTe/PbTe(111) 异质结界面扭转结构是非平衡生长过程中形成的亚稳相. 实际上, 在 MBE 或者金属有机物化学气相沉积 (metal organic chemical vapor deposition, MOCVD) 等非平衡生长过程中, 亚稳相是经常被观察到的, 比如在 GaAs 上外延生长的 GaInP 体系中观察到的自发序<sup>[23]</sup>. 我们通过理论模拟得到的这种扭转结构已经被透射电镜测量所证实, 如图 1(c) 中 AC-STEM 图中展示的界面附近原子排布就和我们的模拟结果吻合, PbTe 和 CdTe(100)

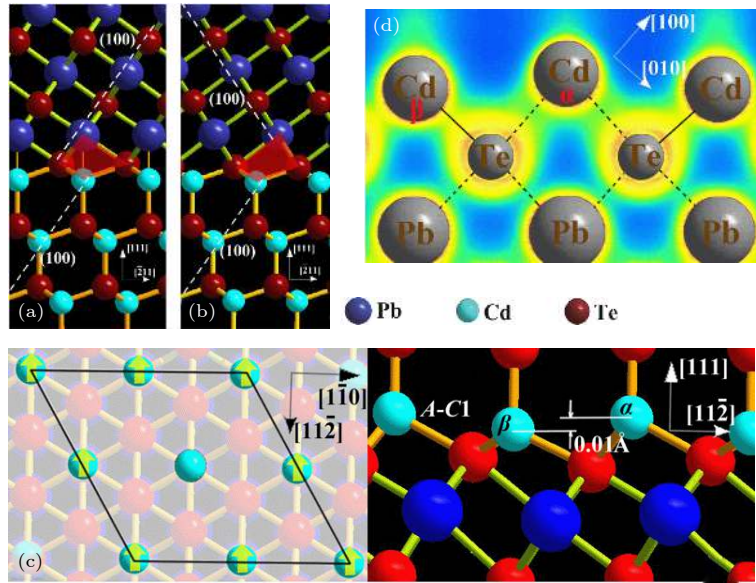


图 2 (a) 内嵌于 CdTe 基底的 PbTe 量子点体系中的 CdTe/PbTe(111) 非扭转界面结构, 注意两层晶体各晶面是平行的, 如白色虚线标示出的 (100) 晶面; (b) 通过在 PbTe(111) 表面外延 CdTe 得到的扭转界面结构, 注意两层晶体的 (100) 晶面有一个夹角, 如白色虚线所示; (c) Cd 原子层开始在 PbTe 表面生长时的重构示意图, 左图为俯视视角, 右图为侧视视角; (d) CdTe/PbTe(111) 界面的电子密度分布, 虚线表示类离子键, 实线表示类共价键<sup>[19]</sup>

Fig. 2. The CdTe/PbTe(111) interface structure of (a) PbTe quantum dots embedded in CdTe and (b) CdTe layer capping on the PbTe(111) surface, it should be noted that the former is non-twisted and the latter is twisted, which is indicated by the relative position of the (100) plane of CdTe and PbTe as marked by the white dashed line; (c) the reconstruction of the first Cd layer on the PbTe(111) surface, the left panel is top-view and the right panel is side-view; (d) the electron density distributions at the twisted CdTe/PbTe(111) interface, the ionic-like and covalent-like bonds are indicated by the dashed and solid lines respectively<sup>[19]</sup>.

面的夹角正好是  $70.6^\circ (2\arccos\sqrt{2/3})$ . 同时, 我们还应该注意到由于扭转现象的存在, 退火 [111] 取向的 CdTe/PbTe/CdTe 量子阱是无法获得菱方八面体 PbTe 量子点的.

在扭转界面上, 由于氯化钠结构和闪锌矿结构相互竞争, 会发生界面重构. 如图 2(c) 所示, 当 CdTe 生长在 PbTe(111) 表面上时, 同一原子层不同侧向元胞的四个原子中, 有一个原子相对其他三个原子会有侧向偏移. 第一层 Cd 原子的侧向偏移为  $0.01 \text{ \AA}$ , 几个原子层后, 偏移逐渐消失, 这说明在扭转界面上形成了  $2 \times 2$  重构. 这种重构现象是氯化钠结构和闪锌矿结构在界面处相互竞争的结果. 在图 2(c) 中, 当 CdTe 在 PbTe(111) 表面生长时,  $3/4$  的  $\alpha$  位置的 Cd 原子 (黄色向上箭头标示) 向上移动试图与 PbTe 的 Te 终止面上的 Te 原子形成氯化钠结构, 而剩下的  $1/4$  的  $\beta$  位置的 Cd 原子与 Te 原子继续保持闪锌矿结构. 在 PbTe 体材料中, Pb 原子和 Te 原子形成离子键; 而在 CdTe 体材料中, Cd 原子和 Te 原子近似形成共价键. 相比体材料的 PbTe 和 CdTe, 在 CdTe/PbTe 界面处的成键不能简单地用离子性或者共价性来描述, 因

为界面处地 Pb—Te 和 Cd—Te 键都是部分离子化的共价键. 图 2(d) 给出了计算得到的界面附近的电子密度, 可以看出, 在扭转界面 Cd 原子层中向上移动的 Cd 原子 ( $\alpha$  位置) 形成的 Cd—Te 键比其他 Cd 原子具有更多的离子性, 这就解释了界面处氯化钠结构和闪锌矿结构的竞争, 这种竞争导致的界面重构反映在图 1(b) 中 RHEED 图样中的重构线上.

### 2.3 CdTe/PbTe(111) 异质结中的 2DEG

我们研究了扭转 CdTe/PbTe(111) 单异质结的电子态性质, 发现在界面处形成了高浓度、高迁移率的 2DEG, 其迁移率和电子浓度在 2 K 时分别为  $20200 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$  和  $4.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ; 在 77 K 时分别为  $6700 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$  和  $9.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , 这些迁移率数据远远高于 CdTe 体材料低温下的数值 (最大为  $2000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ )<sup>[24]</sup>. 我们知道, 一些 IV-VI 族材料的氯化钠结构是不稳定的, 会被强烈的赝姜-泰勒耦合 (pseudo-Jahn-Teller, PJT) 扭曲<sup>[25]</sup>. 通过原子对分布函数分析 (pair distribution function, PDF), 人们观察到 PbTe 在常温下不是

严格的氯化钠晶格结构, 晶格的局部是被扭曲的, 只是宏观上近似表现为氯化钠结构的对称性. 这种扭曲行为类似于铁电扭曲的 Pb 化合物 [26], 像  $\text{PbTiO}_3$ , 其中存在具有孤立电子对的活性  $\text{Pb}^{2+}$  离子. 这预示着  $\text{PbTe}$  的氯化钠结构在某些条件下会变得不稳定.  $\text{CdTe}$  体材料是典型的半绝缘体, 具有较宽的直接带隙 (约 1.6 eV) 和  $sp^3$  杂化形成的闪锌矿结构 [27,28]. 闪锌矿结构在 [111] 方向上存在奇异性, 即面间距是宽窄交替的. 这种奇异性是形成亚稳态扭转结构的重要原因之一. 为了解释  $\text{CdTe}/\text{PbTe}(111)$  异质结中高迁移率二维电子气的形成和探索扭转结构的电子态性质, 我们进行了密度泛函理论计算, 结果表明, 在  $\text{PbTe}(111)$  表面

生长的  $\text{CdTe}$  纳米薄膜具有很高的电子浓度, 与实验观察的结果一致.

我们对扭转界面进行了弛豫计算, 结果显示原本在体材料  $\text{PbTe}$  中相等的 (111) 晶面间距 (1.87 Å) 在界面附近变得宽窄相间, 我们称这种结构变化为“层间褶皱效应”. 图 3(a) 给出了界面处  $\text{PbTe}$  晶面间距, 清晰地展示了这种层间褶皱效应. 同时, 我们的计算结果显示  $\text{CdTe}$  在界面处的结构改变很微小, 大约 4 个原子层后就恢复为体材料结构. 通过计算  $\text{PbTe}$  的轨道分辨的态密度, 我们可以从微观上来理解这种层间褶皱效应的机制. 如图 3(d) 和图 3(e) 所示, 与体材料  $\text{PbTe}$  对应各态相比, 在  $\text{CdTe}/\text{PbTe}(111)$  界面处的一大部分  $\text{Pb}$  6s 态从

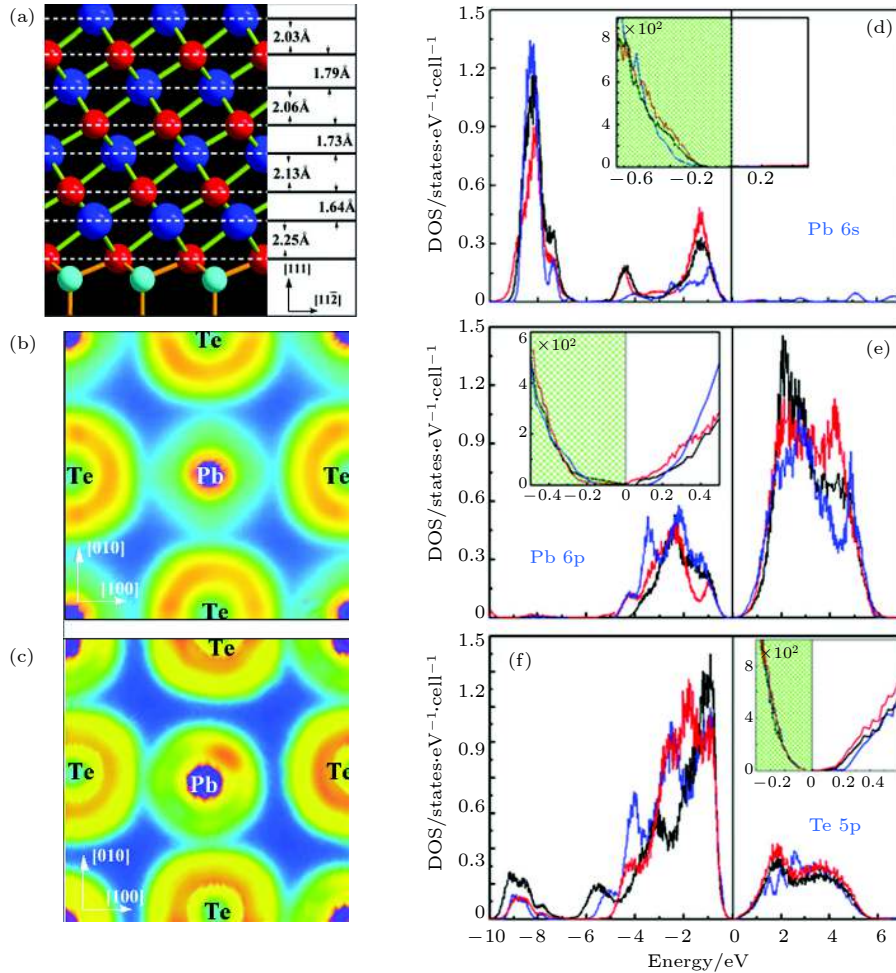


图 3 (a) 扭转界面附近的  $\text{PbTe}(111)$  晶面间距, 红色球代表 Te, 深蓝色球代表 Pb, 浅蓝色球代表 Cd; (b) 离界面 30 个原子层外的  $\text{PbTe}$  中的电子局域函数; (c) 界面附近的  $\text{PbTe}$  中的电子局域函数; (d)  $\text{Pb}$  6s 态, (e)  $\text{Pb}$  6p 态和 (f)  $\text{Te}$  5p 态的轨道分辨态密度, 蓝色线代表  $\text{PbTe}$  体材料, 黑色线和红色线分别代表未弛豫和弛豫的  $\text{CdTe}/\text{PbTe}(111)$  界面附近的  $\text{PbTe}$  层 [18]

Fig. 3. (a) The inter planar spacings of the  $\text{PbTe}(111)$  layers at the twisted interface; the electron localized function of  $\text{PbTe}$  (b) 30 atomic layers away from the interface and (c) at the interface; the orbital-resolved density of states of the (d)  $\text{Pb}$  6s states, (e) 6p states, and (f) the  $\text{Te}$  5p states for bulk  $\text{PbTe}$  (blue lines), and the  $\text{PbTe}$  layers at the twisted interface before (black lines) and after (red lines) relaxation [18].

最低的价带转移到了价带顶附近, 价带顶以下约 8 eV 处的 *s* 峰变宽, 这与 GeTe 或者 GeS 在 NaCl 结构下的态密度很相似<sup>[20]</sup>. 这样一来, Pb 的 *s* 和 *p* 轨道杂化就会增强, 进一步会导致氯化钠结构的扭曲. 所以, 在界面上 PbTe 的氯化钠结构变得不稳定, 也就是 Pb *s*<sup>2</sup> 孤对电子的立体化学行为驱使着两套面心立方子晶格沿 [111] 方向相互偏离它们原来的位置. 在图 3(d)—(f) 中, 我们用红色实线画出了弛豫后的各态密度, 可以看出两套面心立方子晶格的偏移减弱了 Pb 和 Te 原子 *p* 轨道的相互作用, 稍微增强了 Pb *s* 和 *p* 轨道的耦合, 这种效果会随着离界面的距离增大而迅速减弱. 如图 3(b) 中心处的橙色环状区域所示, 对 PbTe 电子局域函数的计算表明, 在远离界面的地方, PbTe 接近体材料, *s*<sup>2</sup> 孤对电子高度局域在 Pb 离子周围近似呈球状. 大部分被占据的 Te *p* 轨道分布在 Te 阴离子周围也近似呈球形. 但是, 在界面附近的电子局域函数却很不相同, 如图 3(c) 所示, *s*<sup>2</sup> 孤对电子聚集到了 Pb<sup>2+</sup> 阳离子的右上方. 这说明在界面附近 PbTe 的氯化钠结构时被 Pb *s*<sup>2</sup> 孤立电子对扭曲的.

我们用 van de Walle 和 Martin<sup>[30]</sup> 提出的方法计算了 CdTe/PbTe(111) 单一界面的带阶, 其中最主要的步骤是确定两种材料平均静电势的阶跃. 同时, 我们通过 XPS 测量 CdTe/PbTe(111) 扭转结构的价带带阶 (valence band offset, VBO), 并且利用 PbTe 和 CdTe 的带隙数值, 计算得到导带带阶 (conduction band offset, CBO)<sup>[16]</sup>. 正如表 1 中列出的, 计算得到的 VBO 比通过 XPS 测量得到的数值略小, 这是因为 XPS 只能测量在 PbTe (111) 表面生长很薄的 CdTe 所形成的异质结界面的带阶, 这种情况下由极性界面引入的电场对实验结果的影响就会比较明显. 不过, 无论是理论计算和是实验测量都表明界面的 VBO 相对于 CBO 来说很小.

本征的 CdTe 体材料是具有较大带隙的半绝

表 1 CdTe/PbTe(111) 界面带阶的理论计算和实验测量数值

Table 1. The VBO and CBO values of CdTe/PbTe (111) interface obtained by theoretical calculations and XPS measurements.

	理论计算 <sup>[18]</sup>	实验测量 <sup>[16]</sup>
VBO/eV	0.030	0.135
CBO/eV	1.380	1.145

缘体, 然而, 极性 CdTe/PbTe 界面可以在薄膜中引起很强的电场从面改变 CdTe 的电子性质. 体材料 PbTe 的导带底在四重简并的 *L* 点, 在 CdTe/PbTe 异质结中, 沿 [111] 方向的周期性被破坏, 使得四个 *L* 点彼此不再等价. 图 4(a) 给出了计算得到的 CdTe/PbTe(111) 异质结沿 [111] 的能带结构, 费米能级设为零点. [111] 方向的 *L* 点投影到了二维布里渊区 (BZ) 的  $\bar{\Gamma}$  点; 另三个 *L* 点 (标记为 *L'*) 投影到了  $\bar{M}$  点, 如图 4(b) 所示. CdTe 中的极化电势差 ( $\Delta\phi^{\text{CdTe}}$ ) 将 CdTe 的导带边下拉到费米能级以下. 在图 4(a) 中, 价带和未被占据的导带分别用蓝色和绿色的点线画出; 红点线表示 *1c* $\Gamma$ , *cL'* 附近的导带界面态和 CdTe 价带  *$\nu\Gamma$*  附近的表面态; 黄色导带是 CdTe 部分占据的体能带. 图 4(a) 给出了费米能级附近几个代表性的电子态面平均波函数平方, 它们分别是 PbTe *1c* $\Gamma$  和 *cL'* 得到的 *a* 态和 *c* 态以及从 CdTe *2c* $\Gamma$  得到的 *b* 态. PbTe 的电子态 *a* 和 *c* 几乎全部局域于靠近界面的褶皱层中, 说明了褶皱层的金属性. 然而, CdTe 的 *b* 态大部分位于界面附近但不是局域的, 这说明 CdTe 靠近界面的一部分也具有金属性. 高的电子浓度是由于界面处 Cd 和 Pb 的部分离子化造成的. 界面处 Cd 和 Pb 的 *s*, *p* 态密度示于图 4(c), 可以看到导带上的电子主要来自 CdTe 薄膜中的 Cd 4*p*, 5*s* 态和 PbTe 褶皱层的 Pb 6*p* 态. 图 4(c) 为异质结中面平均的势能轮廓, 可以看到 CdTe 明显的能带弯曲. 与图 4(c) 的波函数分布结合, 可以看到电子有在界面处堆积的趋势, 所以形成了 2DEG.

对不同厚度的 CdTe/PbTe 薄膜进行霍尔测试, 单独的 PbTe 薄膜总表现为 *p* 型导电, 在 PbTe 表面上的 CdTe 薄膜并没有表现为电阻很大的半绝缘体, 非刻意掺杂使得 CdTe 薄膜变成了电阻很小的 *n* 型导电材料. 霍尔测试结果表明电子浓度随着 CdTe 厚度的减小指数上升, CdTe 厚度为 350 nm 时, 载流子浓度为  $1.27 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 当 CdTe 减小到 30 nm 时, 载流子浓度增大到  $9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , 如图 5(a) 所示. 尽管霍尔效应数据只能给出材料的平均电子浓度, 这已足够说明在界面处存在高浓度的电子气. CdTe 体材料迁移率在 77 K 下最大不超过  $2000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , 而且电子浓度只有  $1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . 我们的异质结样品在 30 nm 厚的 CdTe 中 77 K 时迁移率最大可达约  $6700 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , 常

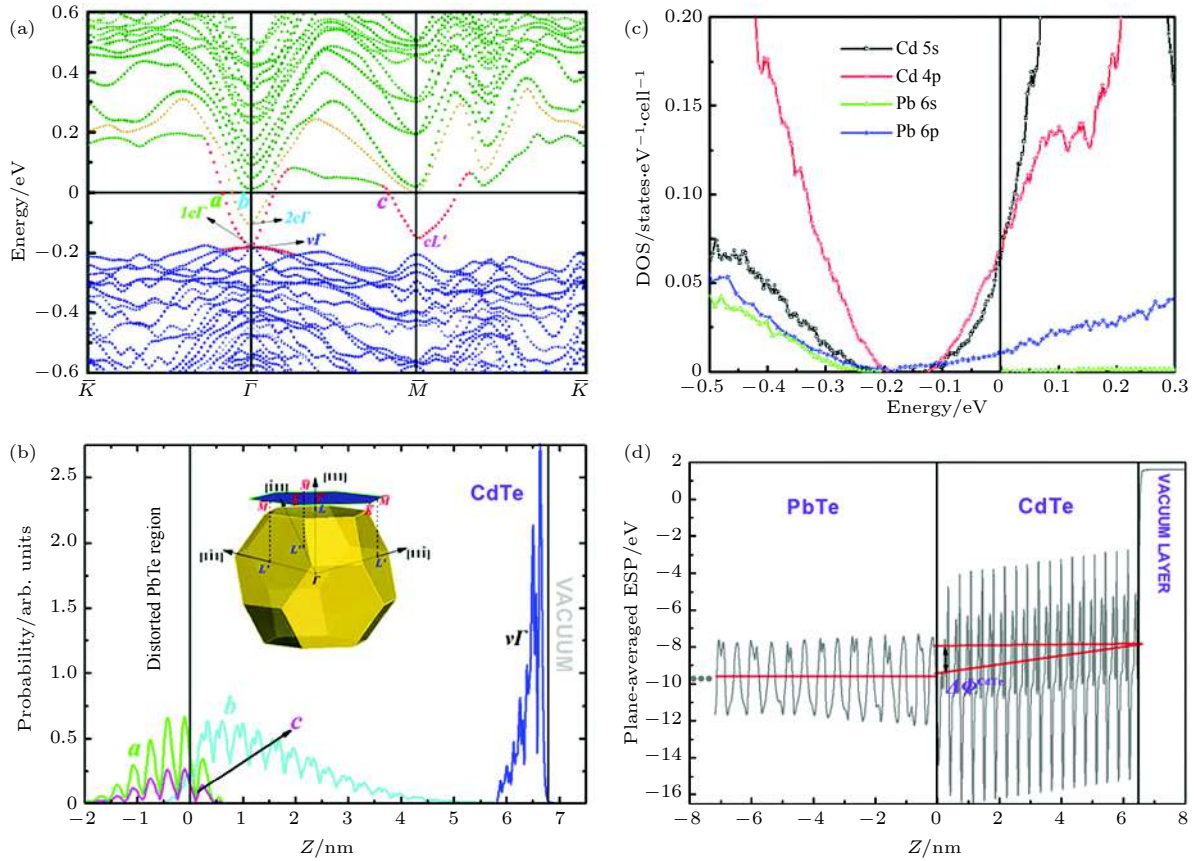


图 4 (a) PbTe(111) 上 CdTe 薄膜的能带结构; (b) 在 (a) 中标出的  $a$ ,  $b$ ,  $c$  和  $v\Gamma$  各态面平均波函数平方, 插图为二维布里渊区和三维布里渊区的对应关系; (c) Cd 和 Pb 在 CdTe/PbTe(111) 界面处  $s$ ,  $p$  的态密度; (d) CdTe/PbTe(111) 界面处的面平均电势<sup>[18]</sup>

Fig. 4. (a) The band structure of the nanoscale CdTe film on the PbTe (111) surface; (b) the plane-averaged wave function squares of the  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , and  $v\Gamma$  states labeled in (a), the inset is the 2D BZ; (c) the DOS of the Cd and Pb valence  $s$  and  $p$  states at the interface of the CdTe/PbTe (111); (d) the plane-averaged ESP for the interface  $A$  formed with a 6.7 nm CdTe film on the PbTe (111) substrate<sup>[18]</sup>.

温下迁移率有  $300\text{--}400\text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , 电子浓度几乎不变, 尽管比报道的常温时的 CdTe 迁移率 ( $1000\text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ) 略低, 但电子浓度高出 4 个数量级. 利用实验中测到的最大电子浓度和理论计算波函数分布得到的导电层厚度约 4 nm, 得到的二维电子气的面密度约为  $3.6 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ .

在真实材料中, PbTe 中存在  $p$  型的背景掺杂 (载流子浓度约  $5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ ), 而 CdTe 中存在  $n$  型的背景掺杂 (载流子浓度约  $5 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ ). 因为 PbTe 材料具有很大的介电常数 ( $\epsilon_r^{\text{PbTe}} = 414$ ), 由 PN 结理论可知, PbTe-侧的带边应该几乎不弯曲. 根据密度泛函理论的计算结果, 我们利用薛定谔方程和泊松方程结合的自洽算法计算了界面附近的带边形状和电子面密度分布. 自洽计算中, 界面附近的初始电子平均面密度设为  $3.6 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ . 我们发现无论是否计入背景掺杂, PbTe 如此大的介电常数都不可能使电子限制在界面附近的

PbTe 褶皱层中. 但是我们的理论计算结果显示褶皱层存在一部分自由电子, 如图 4(b) 所示, 这意味着褶皱层的晶格扭曲已经改变了 PbTe 的介电常数. 由于 PbTe(111) 褶皱层中晶面间距为宽窄相间, 这与 CdTe(111) 晶面结构非常相似, 所以我们假设 PbTe 褶皱层中的介电常数与 CdTe 相同 ( $\epsilon_r^{\text{CdTe}} = 10.2$ ). 图 5(a) 中的插图为自洽计算得到的 CdTe/PbTe 带边结构和电子面密度分布, 它很好地描述了带边结构对二维电子气形成所起到的作用, 电子分布与第一性原理计算的结果相一致, 界面处最大电子浓度为  $5.9 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ . 可以看到, 带阶大部分位于价带中, 与表 1 中计算得到的单一界面带阶参数完全相反. 这是由于在单一界面中, PbTe 和 CdTe 都被认为无限厚的, 没有极性界面引起的电场影响, 而对于由 CdTe 纳米薄膜形成的 CdTe/PbTe(111) 异质结界面, 极化电势差 ( $\Delta\phi^{\text{CdTe}}$ ) 引起了能带弯曲, 使得 CdTe 靠近界



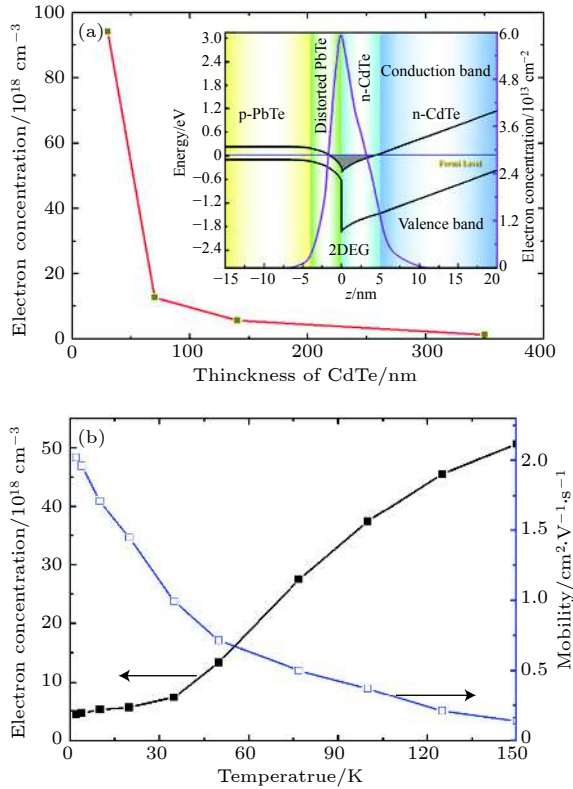


图5 (a) 不同厚度 CdTe 覆盖层的 CdTe/PbTe(111) 异质结中测得的电子浓度, 内插图为通过薛定谔-泊松方程自洽求解得到的带边形状和电子面密度分布; (b) 2—150 K CdTe/PbTe(111) 异质结 2DEG 的电子浓度和迁移率<sup>[18]</sup>

Fig. 5. (a) The electron concentrations in the CdTe/PbTe(111) heterojunction with different CdTe capping thickness measured at 300 K, the inset shows the band profile and the electron density of the CdTe/PbTe heterojunction calculated by a Schrodinger-Poisson solver; (b) the electron concentrations and mobilities in the CdTe/PbTe heterojunction at different temperatures<sup>[18]</sup>.

面的导带边下移, 从而使这部分 CdTe 成为了 n 型导电材料.

由于  $\Delta\phi^{\text{CdTe}}$  不随 CdTe 厚度  $L_{\text{CdTe}}$  的改变而改变, 所以电子气在 CdTe 区域的厚度随  $L_{\text{CdTe}}$  的增大而增大, 这就合理地解释了为什么霍尔测得的平均电子浓度随  $L_{\text{CdTe}}$  增大而减小, 但在  $L_{\text{CdTe}}$  大于 350 nm 时电子浓度仍保持  $1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  以上. 我们通过积分界面附近的 Cd 5s, 4p 以及 Pb 6p 态的电子密度估计的二维电子气的电子浓度高达  $6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 与实验中估计的结果很接近. 如图 5(b) 所示, 在不同温度下对样品进行了霍尔测量, 结果表明 77 K 时电子浓度为  $3.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 迁移率  $6700 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ; 在温度为 2 K 时, 电子浓度为  $4.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 迁移率高达  $20200 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , 常温时迁移率为 300—400  $\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ . CdTe/PbTe

(111) 异质结具有和 AlN/GaN 异质结相同的简单结构, AlN/GaN 异质结中同样存在高浓度 (77 K 时  $3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) 高迁移率 (77 K 时  $5000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ) 的二维电子气. 相比基于调制掺杂的二维电子气结构, 例如 GaAs/AlGaAs 系统<sup>[31]</sup>, 在 77 K 可以提供更高的迁移率 ( $\sim 69000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ), 但是电子浓度只有约  $5.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . SiGe/Si 在 77 K 时获得了较高的迁移率 ( $9000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ), 但电子浓度也相对较低 ( $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )<sup>[32]</sup>, ZnCdSe/ZnSe 系统在 4.2 K 下获得了可以相比的迁移率  $7900 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ <sup>[33]</sup>, 但是电子浓度比我们的结构小两个数量级. 从之前报道的 AlN/GaN 异质结以及本文中讨论的 CdTe/PbTe(111) 异质结可以看出, 通过调制掺杂在量子阱中获得的二维电子气不仅结构更加复杂, 而且浓度总是比单异质结极化界面上形成的二维电子气浓度低很多. 同时注意到 CdTe 比 CdZnSe 具有更大的自旋轨道耦合分裂能 (CdTe 为 0.95 eV, ZnSe 为 0.42 eV)<sup>[34]</sup>, 这有利于研究自旋电子学中的相关性质.

### 3 CdTe/PbTe(111) 异质结 2DEG 的输运性质

#### 3.1 CdTe/PbTe(111) 异质结 2DEG 量子振荡

在 CdTe/PbTe(111) 异质结中的高迁移率 2DEG 在低温强磁场下表现出非常清晰的量子振荡. 如图 6 所示, 在温度为 0.3 K, 磁场最高至 14 T 的条件下, 纵向电阻  $R_{xx}$  在线性背景上出现了舒伯尼科夫-德哈斯 (Shubnikov de Hass, SdH) 振荡. 并且在  $R_{xx}$  显示极小值的磁场处, 霍尔电阻  $R_{xy}$  出现了明显的平台结构. 图 7(a) 为扣除线性背景后磁阻的振荡部分  $R_{xx}$ . 利用振荡起始处的磁场 ( $\sim 1.6 \text{ T}$ ) 及量子振荡临界条件  $\mu q B = 1$  的标准, 可以推测出量子迁移率约为  $\mu q \sim 6000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ . 我们给每一个磁阻  $R_{xx}$  极小值分配朗道能级填充因子. 在  $B > 7 \text{ T}$  的高磁场区域, 相邻振荡的填充因子增加数为 1; 而在 3—7 T 的磁场范围内, 相邻振荡的填充因子增加 2, 这源于自旋简并; 而在小于 3 T 的磁场区域, 相邻振荡的填充因子增加量为 4, 这意味着存在额外的一种 2 重简并机制, 我们推测这种 2 重简并与 PbTe 能谷的能谷简并有关. 图 7(b) 为填充因子  $\nu$  与  $1/B$  的关系, 从图中线型拟

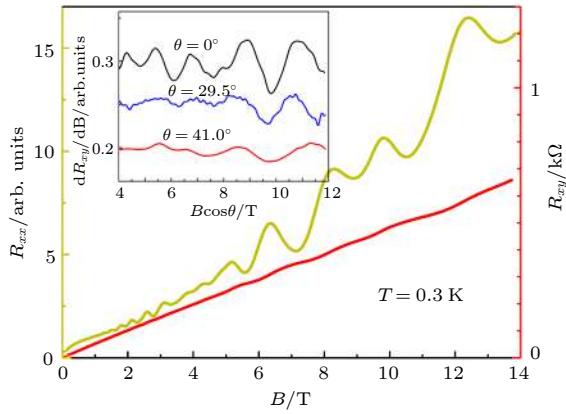


图 6 CdTe/PbTe(111) 异质结的磁阻  $R_{xx}$  和霍尔电阻  $R_{xy}$ , 其中内插图变为磁场角度的  $dR_{xy}/dB$ <sup>[21]</sup>

Fig. 6. Magneto-resistance  $R_{xx}$  and Hall resistance  $R_{xy}$  in CdTe/PbTe(111) heterojunction. Quantum oscillations are observed at high magnetic fields. Plateau-like features are observed in  $R_{xy}$  at high  $B$  fields, where  $R_{xx}$  displays a strong minimum. Inset:  $dR_{xy}/dB$  versus  $B \cos \theta$  at three selected tilting angles of the magnetic field<sup>[21]</sup>.

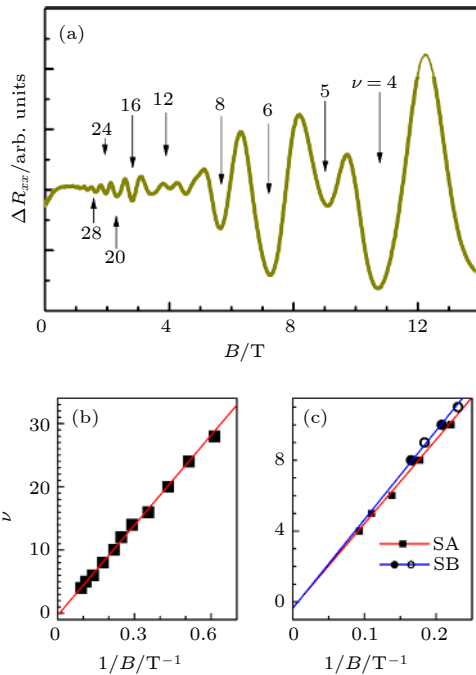


图 7 (a) 扣除线性背景后的磁阻振荡部分  $\Delta R_{xx}$ , 箭头标示填充的朗道能级; (b) 朗道能级线性拟合, 在  $1/B = 0$  处截距为  $-0.34$ , 接近  $-0.5$ ; (c) 图 (b) 中  $1/B = 0$  附近的局部放大图, 同时加入了在另外的样品上重复实验得到的数据 (SB), 两组数据均表明,  $1/B = 0$  处的截距接近  $-0.5$ <sup>[21]</sup>

Fig. 7. (a)  $\Delta R_{xx}$  (obtained after subtracting a smooth background from  $R_{xx}$ ) as a function of magnetic field, the arrows mark the Landau level fillings; (b) Landau level fan diagram, the line is a linear fit to the data points, the intercept at  $1/B = 0$  is  $-0.34$ , close to  $-0.5$ ; (c) the zoomed region close to  $1/B = 0$  for sample A (SA), data from sample B (SB) are also included, in both samples, the intercept at  $1/B = 0$  is close to  $-0.5$ <sup>[21]</sup>.

合的斜率可以得到 2DEG 的面密度约为  $1.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . 线性外插到  $1/B = 0$  时, 截距为  $-0.34$ . 注意, 低磁场下霍尔效应测得的电子面密度为  $1.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 这要远大于从量子振荡得到的电子密度  $n \sim 1.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . 二者之间的差异表明在 PbTe/CdTe 异质结系统中同时存在界面 2DEG 和体材料的载流子, 这里的体载流子很可能来自于 CdTe 层. 这种两类载流子的模型也与零磁场附近的正磁阻实验现象吻合. 霍尔电阻  $R_{xy}$  在磁场为 1 T 时已经偏离线性磁场依赖性, 此时已接近三维量子极限. 为了进一步确认量子振荡起源于 2DEG, 我们做了倾斜磁场角度的测量. 图 6 的内插图选定的几个倾斜角度下的  $dR_{xy}/dB$  与  $B \times \cos \theta$  的关系, 图中可以清楚地看到量子振荡的极小值点的位置随着磁场垂直分量的变化而变化, 因而证明了量子振荡来源于 CdTe/PbTe(111) 界面处的 2DEG.

图 7(b) 和图 7(c) 中的线性拟合得出的  $1/B = 0$  处的截距非常接近  $-0.5$ , 这表明 CdTe/PbTe(111) 界面处 2DEG 的贝里相位为  $\pi$ , 即该 2DEG 为狄拉克电子系统<sup>[35]</sup>. 但是, 本征的 PbTe 是一种常规绝缘体, 它如果要表现出狄拉克费米子的性质, 必须通过拓扑相变成为拓扑晶体绝缘体 (topological crystalline insulator, TCI), 实现这种拓扑相变的方法之一就是引入压应力<sup>[36]</sup>. 最近, 已经有关于通过掺杂  $\text{Te}_{\text{Pb}}$  反位缺陷在 PbTe 中引入化学内应力将其转变成 TCI 的报道<sup>[37]</sup>. 另外, 在高度应变的 InN 量子阱中, 会产生极性势场诱导的狄拉克电子系统<sup>[38]</sup>. 这些工作可以帮助我们理解 CdTe/PbTe (111) 异质结 2DEG 中的狄拉克电子性质. 首先, 界面附近的 PbTe 不再是严格的等晶面间距结构, 特别是在界面最近处的 PbTe(111) 面间距增加, 有可能会产生面内的压应变, 从而引发能带翻转, 实现拓扑相变; 其次, PbTe 和 CdTe(111) 面均为极性面, 这不可避免地会引入相当大的界面极性势场, 这种势场与 PbTe 中强的自旋轨道耦合相结合, 能够使 2DEG 向狄拉克费米系统转变. 为了保证  $\pi$  贝里相位的准确性, 我们在高达 60 T 的脉冲强磁场下做了量子振荡实验, 可以分辨出朗道填充因子接近 1 的振荡, 从而更加准确地确定了朗道能级线性拟合中的截距, 即准确确定贝里相位. 如图 8(c) 所示, 线性拟合在  $1/B = 0$  处地截距为  $-0.52 \pm 0.07$ , 更确切地表明 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的贝里相位为  $\pi$ , 所以该体系是一个狄拉克

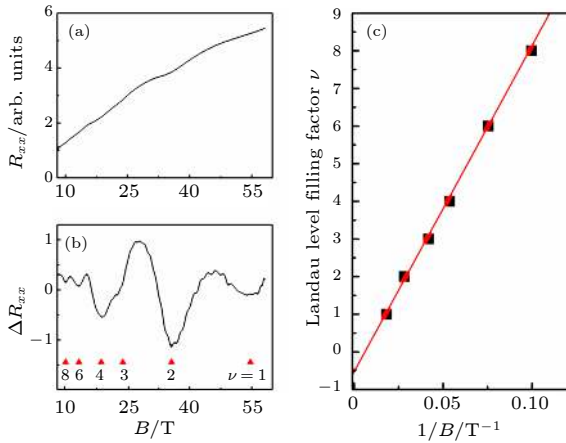


图 8 (a) CdTe/PbTe(111) 异质结的磁阻  $R_{xx}$ ; (b) 扣除背景后的磁阻振荡部分  $\Delta R_{xx}$  和填充因子  $\nu$ ; (c) 朗道能级线性拟合, 可以确切地看到  $1/B = 0$  处截距为  $-0.52 \pm 0.07$ ; 测量在温度 1.5 K, 磁场最高达 60 T 的条件下进行<sup>[21]</sup>

Fig. 8. (a)  $R_{xx}$  measured at  $\sim 1.5$  K, quantum oscillations are clearly seen; (b) after subtracting background, the oscillating part  $\Delta R_{xx}$  is presented with the Landau filling factors marked by the red triangles; (c) Landau fan diagram linear fitting demonstrates that the intercept at  $1/B = 0$  is  $-0.52 \pm 0.07$ <sup>[21]</sup>.

电子系统. 鉴于此, CdTe/PbTe(111) 异质结 2DEG 无疑适用于研究自旋电子学以及相关器件应用.

### 3.2 CdTe/PbTe(111) 异质结 2DEG 的电场调控

实现对 2DEG 电子态的有效调控对于物理研究和器件应用具有非常重要的意义. 目前最常用的手段是通过外加电场调控 2DEG, 也就是场效应晶体管 (FET). 传统的手段是以  $\text{SiO}_2$  或者其他氧化物作为栅极介质, 构建金属-氧化物-半导体 (MOS) 三明治结构, 通过在类似于电容器构型的 MOSFET 器件上施加栅电压, 电荷可以在半导体表面积累, 实现对半导体的载流子调控. 但是受介电层击穿电压的限制, 该技术对载流子的调控能力有限. 日本的 Iwasa 等<sup>[39]</sup> 发展了用离子液体做介电层的电双层场效应晶体管 (EDL-FET) 技术, 可以在固体-液体界面处形成一个厚度为纳米量级的具有超大电容的电容器, 通过施加较小的栅电压就可以获得超强电场, 其调控载流子的能力比传统的 MOSFET 高一个数量级. 我们采用了 EDL-FET 结构对 CdTe/PbTe(111) 异质结进行调控, 器件结构如图 9(c) 所示. 从图 9(a) 和图 9(b) 的输出特性曲线和转移特性曲线来看, EDL-FET 对 2DEG 确实起到了一定的调控效果, 但是由于 CdTe/PbTe 异质

结 2DEG 本身的电子浓度很高, 调控效果不显著, 开关比仅为 2. 这一点同样反映在图 9(d) 中的面电阻和温度的依赖关系上, 不同栅压下的电阻虽然有差异, 但是并没有数量级上的变化. 如果想获得高的开关比, 一方面需要降低 2DEG 本身的电子浓度, 另一方面可以尝试调控能力更加强大的手段, 比如最近发展的固态离子导体基场效应晶体管 (SIC-FET) 技术<sup>[40]</sup>. 另外, 由于 FET 技术的调控只能到达介电层以下几十纳米深度范围, 所以我们必须设法让 2DEG 所在的 CdTe/PbTe 界面尽可能靠近介电层, 这就意味着我必须得设想办法尽可能地减薄 CdTe 覆盖层的厚度. 这对材料生长是一个新的挑战.

尽管未能取得理想的调控效果, 我们对 EDL-FET 调控 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的尝试还是在探索该体系的电子态性质方面起到了作用. 如图 10(a) 所示, 在不同栅压下, 2DEG 的 SdH 振荡发生了变化. 从图 10(b) 中可以更加清楚地看到这一点, SdH 振荡的振幅和频率都发生了变化. 图 10(c) 中的不同栅压下的朗道能级线性拟合斜率不同<sup>[35]</sup>, 说明费米面发生了变化, 即在 EDL-FET 的调控下, 2DEG 的费米能级扫过了狄拉克锥的不同位置. 同时, 在  $1/B = 0$  处的截距不变, 表明没有发生拓扑相变, 该 2DEG 依然是一个狄拉克电子系统. 我们可以期待, 如果能够实现对 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的有效调控, 那么就可以详尽地研究这个狄拉克电子系统各个态的性质.

## 4 CdTe/PbTe(111) 异质结 2DEG 的物理效应及相关应用

### 4.1 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的声子屏蔽效应及潜在的热电应用

我们利用拉曼散射光谱研究 CdTe/PbTe(111) 异质结, 发现该异质结界面 2DEG 对 PbTe 的光学声子有很强的抑制效应. PbTe 晶体是以 NaCl 式的岩盐结构结晶的, 对于无晶格缺陷的单晶而言, 理论上其一阶振动模式是拉曼失活的, 因而理论预期在拉曼散射光谱的测量中观察不到声子散射峰. 然而, 由于形变、化学配比失衡、晶格失配或生长过程中的薄膜与衬底间的热失配等各种原因, 导致外延单晶薄膜偏离理想的 NaCl 晶体结构, 结果 PbTe 外延薄膜中并非所有的离子都位于反演

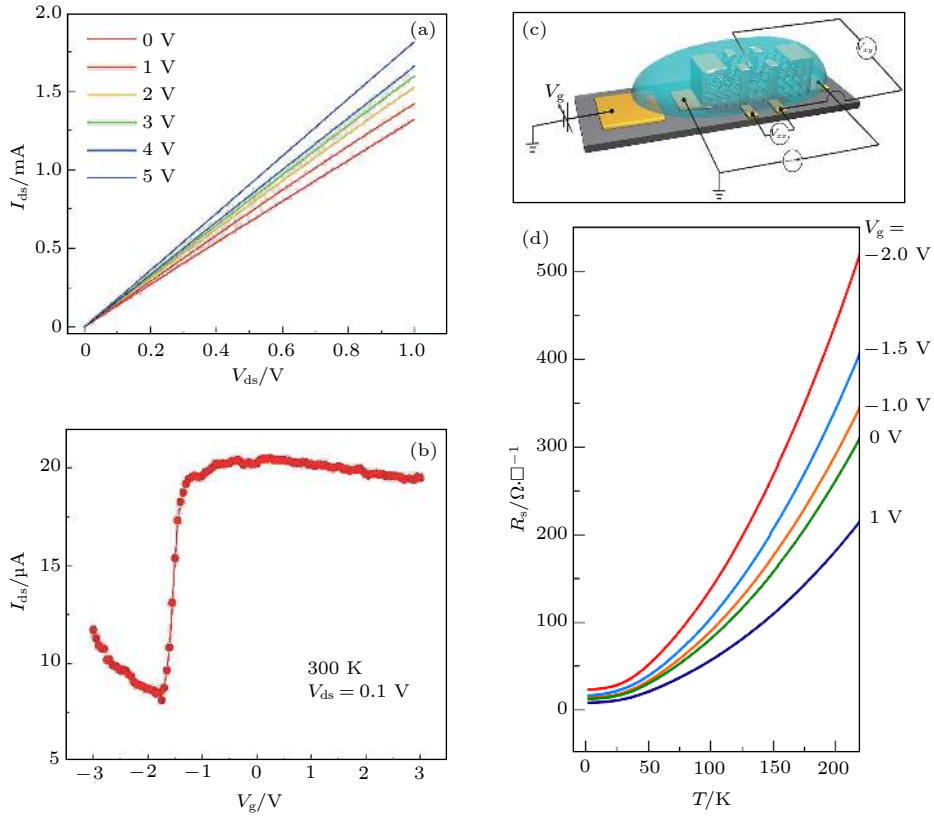


图 9 基于 CdTe/PbTe(111) 异质结的 EDL-FET (a) 输出特性曲线和 (b) 转移特性曲线; (c) EDL-FET 结构示意图; (d) 不同栅压下的面电阻和温度的依赖关系<sup>[22]</sup>

Fig. 9. The output characteristic (a) and (b) transfer characteristic of the EDL-FET based on CdTe/PbTe(111) heterojunction; (c) the schematic diagram of the EDL-FET structure; (d) temperature dependence of sheet resistance  $R_s$  at selected gate voltages<sup>[22]</sup>.

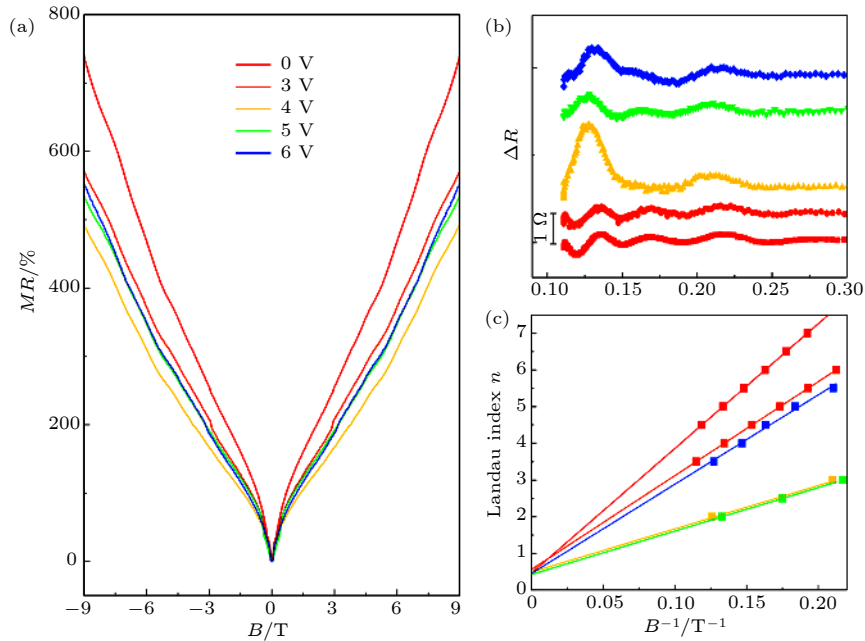


图 10 (a) 2 K 温度下不同栅压对应的磁阻; (b) 栅压调控下 SdH 振荡的振幅和周期变化; (c) 不同栅压下的 SdH 振荡的朗道能级线性拟合<sup>[22]</sup>

Fig. 10. Gate-tunable SdH oscillation in 2DEG: (a) Magnetoresistance measured under perpendicular magnetic field at 2 K with various gate voltages; (b) SdH oscillations versus  $1/B$  after subtracting the background, showing systematic changes to the oscillation amplitude and period with gate voltage; (c) a Landau fan diagram for SdH oscillation at different gate voltages<sup>[22]</sup>.

对称的中心,这就弱化了晶体对拉曼散射的选择定则.所以,理论上失活的声子模式在拉曼散射实验中经常可以看到,如图 11(a)所示.我们将 CdTe/PbTe 异质结的拉曼谱与 PbTe 和 CdTe 各自的拉曼谱进行对比,如图 11(b)所示,绿实线为 CdTe/PbTe 异质结构的拉曼谱,其中 CdTe 覆盖层的厚度为 30 nm.为了进行直接对比,图中也用红色实线给出了 PbTe 对比样品的拉曼谱.可以看出, CdTe/PbTe 异质结在 123, 141, 164 和 328  $\text{cm}^{-1}$  处出现了明显的拉曼峰,这些振动模式在关于 CdTe 的较早的研究文献中已有报道<sup>[41]</sup>:在 123 和 141  $\text{cm}^{-1}$  出现的拉曼峰分别为 Te 沉淀物的 A1 模式及  $\text{TeO}_2$  的 LO 声子模式,而在 164 和 328  $\text{cm}^{-1}$

处的两个峰是 CdTe 层的 LO 声子模式及其双子模式.最有趣的是, CdTe 薄层下面所覆盖 PbTe 的声子模式从拉曼谱图中完全消失,即 PbTe LO (119  $\text{cm}^{-1}$ ), 2LO (238  $\text{cm}^{-1}$ ), CPPM  $\omega_0$ (183  $\text{cm}^{-1}$ ),  $2\omega_0$  (366  $\text{cm}^{-1}$ ) 等.

研究表明, CdTe/PbTe(111) 界面高浓度的 2DEG 可以屏蔽晶格振动的极化效应,这将极大地抑制极性振动声子模式的振动强度,这也正是在测量 CdTe/PbTe(111) 异质结构的拉曼散射谱时观察不到下层 PbTe 拉曼信号的原因<sup>[20]</sup>.该声子屏蔽效应在 PbTe 的热电方面具有应用前景,因为热电材料要求在保持较好的导电性能的同时具有较低的热导率.在半导体材料中,声子是很重要的导热载体,通过抑制声子传热来降低热导率是一个有效的方法.在 PbTe 中,理论计算表明,在相应热电转换器件工作的 300—700 K 温度范围内,光学声子可以贡献高达 22% 的晶格热导率<sup>[42]</sup>.可以期待的是, CdTe/PbTe(111) 界面处有效的光学声子屏蔽效应,可以有效地降低基于 PbTe 的热电器件的热导率.同时, 2DEG 的高导电性又能提供导电通道,从而形成类似于  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$  超晶格中实现的声子屏蔽/电子透射结构<sup>[43]</sup>,对发展高效率的热电器件极为有利.而且,在 PbTe-CdTe 合金中,已经观察到了由于晶格热导降低和电子态性质改善导致的热电优值增强<sup>[44]</sup>,这表明 CdTe/PbTe 异质结在热电器件应用方面是前景光明的.

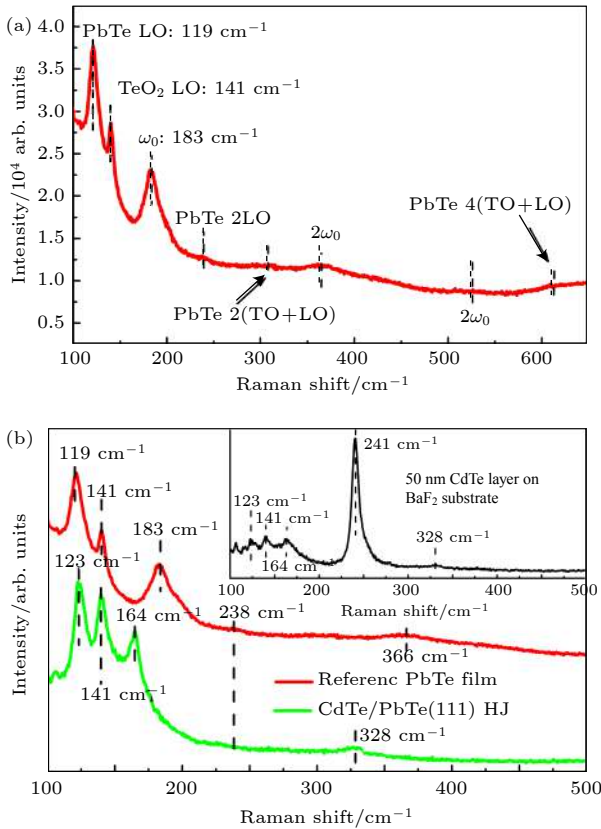


图 11 (a) PbTe 薄膜的拉曼谱图; (b) 30 nm 厚度的 CdTe 覆盖的 CdTe/PbTe(111) 异质结的拉曼谱图 (绿色线), 内插图为  $\text{BaF}_2$  衬底上直接生长 50 nm CdTe 层的拉曼谱; 为了便于直接对比, 图中也给出了 PbTe 样品的拉曼谱图 (红线)<sup>[20]</sup>

Fig. 11. (a) Raman shifts for an epitaxial PbTe reference sample, multiple optical phonon modes dominate the spectral profile; (b) raman shifts for a CdTe/PbTe(111) HJ with 30 nm CdTe capping layer (green line), the inset is a Raman spectrum for a 50 nm CdTe layer on a  $\text{BaF}_2$  substrate. For direct comparison, the Raman shift of the reference PbTe film is plotted in a red line<sup>[20]</sup>.

## 4.2 表面等离子激元光致发光增强效应和红外探测器

我们很早就发现由 CdTe/PbTe(111) 界面上的表面等离子体 (surface plasmon, SP) 耦合导致的中红外光致发光 (photoluminescence, PL) 增强<sup>[17]</sup>.如图 12 所示,在实验上我们观察到了 CdTe/PbTe 单异质结具有明显的 PL 增强效应,并提出该效应是由 SP 与中红外光子共振耦合引起的.在 CdTe/PbTe 界面局域的高浓度 2DEG 是 SP 的载体,与 PbTe 层出射的中红外光子耦合形成局域 SP 模,增大了 PbTe 层中偶极子的辐射复合概率,实现了中红外 PL 的增强.这一发现对操控中红外 PL 和提升中红外光电器件的性能有一定的启发作用.而 PbTe 本身作为传统的窄带隙材料,本身就适合应用于红外光电器件应用领域.而 CdTe/PbTe(111) 异质结亦能在红外应用领域找到用武之地.这里仅

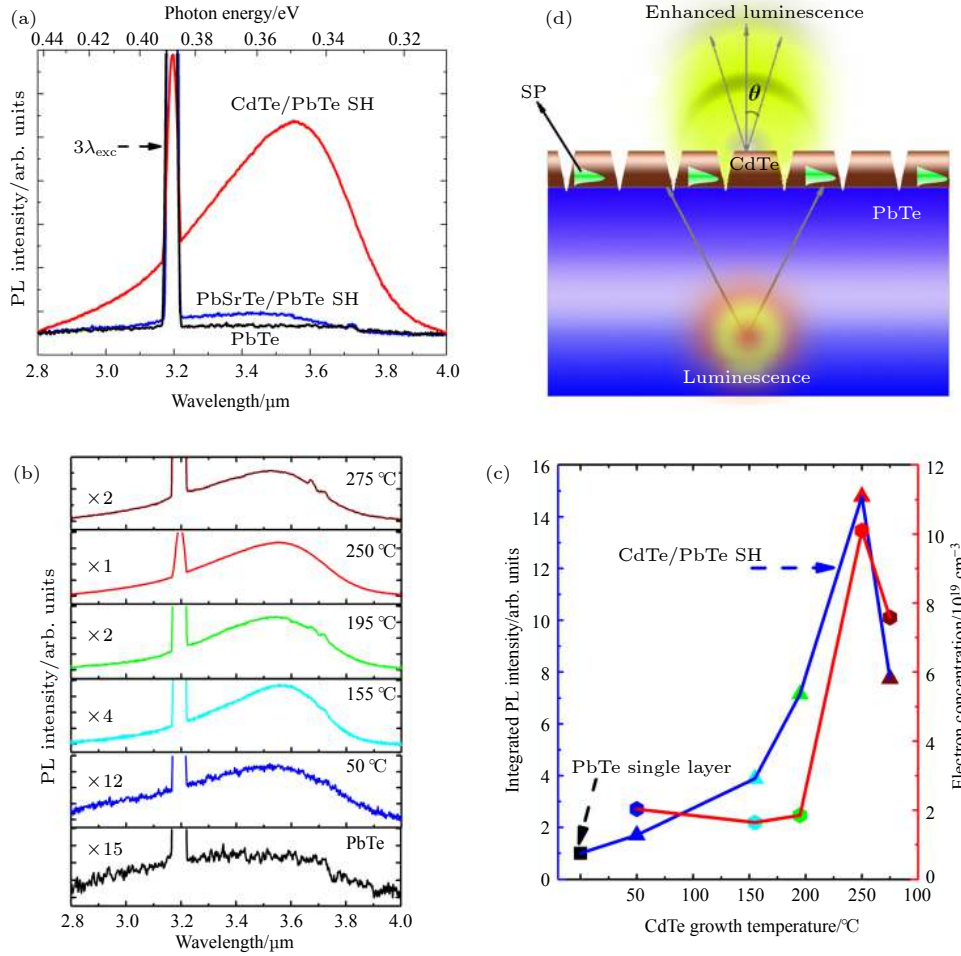


图 12 (a) CdTe/PbTe 单异质结样品、PbTe 体材料样品和 PbSrTe/PbTe 单异质结样品的 PL 谱，图中 3.2  $\mu\text{m}$  处的尖峰是 1.064  $\mu\text{m}$  激光的散射光；(b) 不同 CdTe 生长温度的 CdTe/PbTe 单异质结的 PL 谱；(c) CdTe/PbTe 单异质结 PL 积分强度以及实验测得的电子浓度随 CdTe 生长温度变化曲线；(d) SP 与中红外光子耦合增强 PL 效应的示意图<sup>[17]</sup>

Fig. 12. (a) Comparison of three typical MIR PL spectra measured at room temperature for a CdTe/PbTe single heterojunction (SH), a PbSrTe/PbTe SH, and a PbTe single layer; (b) MIR PL for CdTe/PbTe SHs with different CdTe growth temperature  $T_{\text{CdTe}}$ ; (c) integrated PL intensities derived from (b) and electron densities of the SHs measured by Hall effect versus  $T_{\text{CdTe}}$ , the square symbol represents PL intensity from a PbTe single layer; (d) schematic representation of CdTe/PbTe for plasmonic enhancement of MIR emission<sup>[17]</sup>.

举我们近期发展的基于 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的高速室温中红外探测器作为例子。

我们近期发展了基于 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的红外探测器，其器件的原理很简单，当中红外光照射在 CdTe/PbTe 异质结上时，PbTe 内会形成光生载流子，并迅速进入到 2DEG 沟道内，从而引起宏观上的电导变化，所以基于该异质结的中红外探测器具有很高的响应速度。我们的原型器件结构如图 13(a) 所示，类似于一个典型的光电导探测器。它的响应截至波长在 4  $\mu\text{m}$ ，而且响应率随着偏压增大而增大，如图 13(b)。使用时间尺度在飞秒量级的脉冲激光来激发探测器，探测器的脉冲响应速度很快，如图 13(c)。仔细对单个脉冲响应进

行分析，可以看到，该探测器的响应上升时间约 5 ns，衰减时间约 50 ns，如图 13(d)。并且，它的探测率在室温下可以达到  $3 \times 10^{10}$  Jones。总体而言，作为一个工作在室温下的中红外探测器，我们的 CdTe/PbTe 原型器件在响应速度和探测率上都具有商用研发价值。而这仅仅是 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的应用的一个方面，它还有可能在 HEMT、自旋器件等方面大显身手。

## 5 总结与展望

以 CdTe/PbTe 异质结为代表的 IV-VI 族化合物半导体异质结具有独特的性质，它们不仅可在传

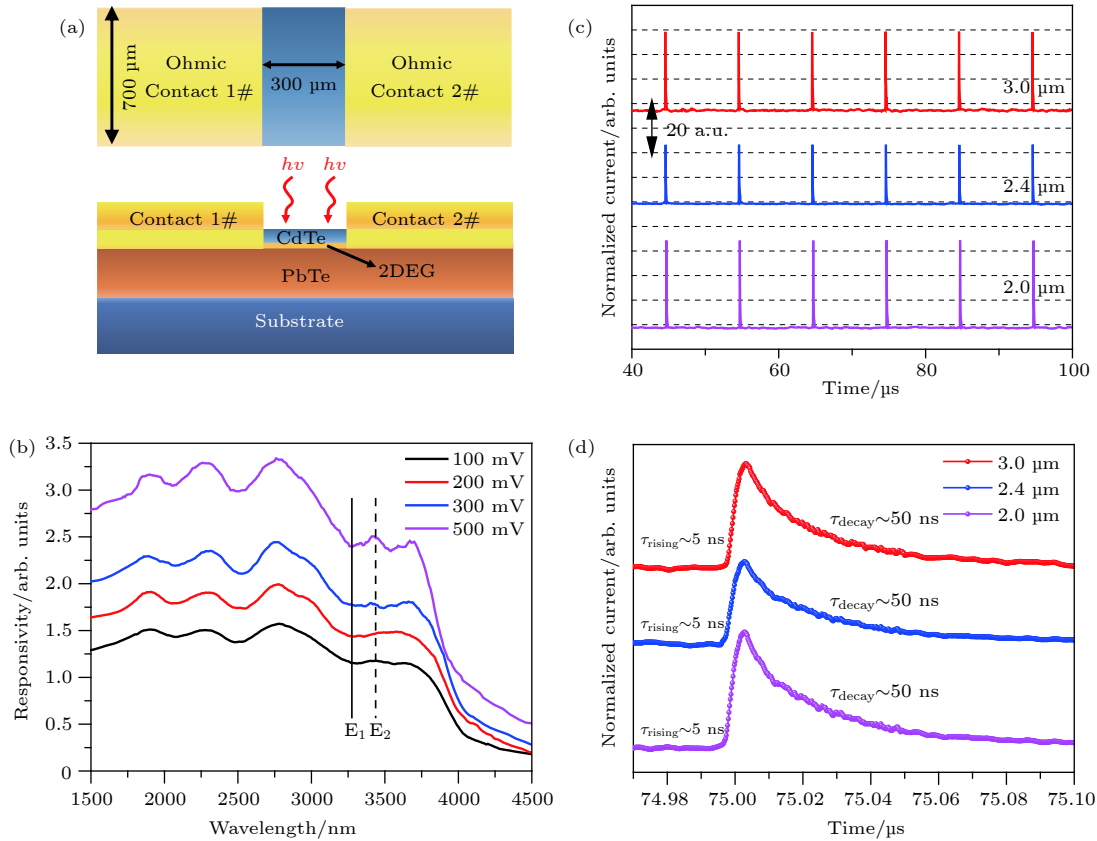


图 13 (a) CdTe/PbTe 异质结探测器的俯视图和侧视图; (b) 室温时探测器在不同偏压下的红外响应光谱; (c) 探测器在不同波长脉冲激光下的脉冲响应; (d) 探测器的时间分辨响应

Fig. 13. (a) Top-view and side-view of the CdTe/PbTe heterojunction photodetector; (b) the photoresponse spectra of the photodetector under different bias voltages at room temperature; (c) impulse photoresponses under laser of different wavelengths; (d) time-resolved photoresponse.

统的功能材料领域发挥重要作用, 还拥有令人兴奋的新奇物理. 特别是 CdTe/PbTe 异质结 2DEG 的发现, 为研究自旋轨道耦合效应提供了很好的平台, 同时也为将来发展自旋电子器件提供了一个选择. 这种特殊的晶格结构失配的异质结为人工构建半导体奇异结构提供了新的思路. 但是, 现在依然存在一些亟待解决的问题, 比如, 如何通过优化材料生长工艺提高 2DEG 的迁移率, 如何找到有效的调控手段对 2DEG 进行外场调控等. 不过, 现阶段的 IV-VI 族化合物半导体异质结已经展现出发展实用器件的潜力, 那么随着半导体工艺的不断发展, 先进的技术一定能为这些问题找到解决方案, 届时 IV-VI 族化合物半导体异质结必将发挥更重大的作用.

### 参考文献

[1] Bardeen J, Brattain W H 1948 *Phys. Rev.* **74** 230  
 [2] Brattain W H, Bardeen J 1948 *Phys. Rev.* **74** 231

[3] Nakamura S, Mukai T, Senoh M 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 1687  
 [4] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 494  
 [5] König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766  
 [6] Cao Y, Fatemi V, Fang S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43  
 [7] Rogalski A 2012 *Opto-Electronics Review* **20** 279  
 [8] Springholz G, Ueta A Y, Frank N, Bauer G 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 2822  
 [9] Yuan S, Springholz G, Bauer G, Kriechbaum M 1994 *Phys. Rev. B* **49** 5476  
 [10] Rahim M, Arnold M, Felder F, Behfar K, Zogg H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 151102  
 [11] Koga T, Harman T C, Cronin S B, Dresselhaus M S 1999 *Phys. Rev. B* **60** 14286  
 [12] Casian A, Sur I, Scherrer H, Dashevsky Z 2000 *Phys. Rev. B* **61** 15965  
 [13] Koike K, Honden T, Makabe I, Yan F P, Yano M 2003 *J. Cryst. Growth* **257** 212  
 [14] Heiss W, Groiss H, Kaufmann E, Hesser G, Böberl M, Springholz G, Schäffler F, Koike K, Harada H, Yano M 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 192109  
 [15] Hasegawa M M, de Andrada e Silva E A 2003 *Phys. Rev. B* **68** 205309  
 [16] Si J, Jin S, Zhang H, Zhu P, Qiu D, Wu H 2008 *Appl. Phys.*

- Lett.* **93** 202101
- [17] Cai C, Jin S, Wu H, Zhang B, Hu L, McCann P J 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 182104
- [18] Jin S, Cai C, Bi G, Zhang B, Wu H, Zhang Y 2013 *Phys. Rev. B* **87** 235315
- [19] Jin S, Cai C, Zhang B, Wu H, Bi G, Si J, Zhang Y 2012 *New J. Phys.* **14** 113021
- [20] Zhang B, Cai C, Zhu H, Wu F, Ye Z, Chen Y, Li R, Kong W, Wu H 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 161601
- [21] Zhang B, Lu P, Liu H, Jiao L, Ye Z, Jaime M, Balakirev F F, Yuan H, Wu H, Pan W, Zhang Y 2015 *Nano Lett.* **15** 4381
- [22] Zhang L, Shu T, Wu H, Ye Z, Zhu L 2019 *Phys. Status Solidi* **13** 1800551
- [23] Mascarenhas A 2012 *Spontaneous Ordering in Semiconductor Alloys* (Springer Science & Business Media)
- [24] Suzuki K, Seto S, Sawada T, Imai K 2002 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **49** 1287
- [25] Waghmare U V, Spaldin N A, Kandpal H C, Seshadri R 2003 *Phys. Rev. B* **67** 125111
- [26] Božin E S, Malliakas C D, Souvatzis P, Proffen T, Spaldin N A, Kanatzidis M G, Billinge S J L 2010 *Science* **330** 1660
- [27] Su C H 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 084903
- [28] Segall B, Lorenz M R, Halsted R E 1963 *Phys. Rev.* **129** 2471
- [29] Bissert G, Hesse K F 1978 *Acta Crystallographica Section B* **34** 1322
- [30] van de Walle C G, Martin R M 1987 *Phys. Rev. B* **35** 8154
- [31] Hiyamizu S, Mimura T, Fujii T, Nanbu K, Hashimoto H 1981 *Jpn. J. Appl. Phys.* **20** L245
- [32] Ismail K, Meyerson B S, Wang P J 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 2117
- [33] Kikkawa J M, Smorchkova I P, Samarth N, Awschalom D D 1997 *Science* **277** 1284
- [34] Madelung O 2012 *Semiconductors: Data Handbook* (Springer Science & Business Media)
- [35] Ando Y 2013 *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** 102001
- [36] Hsieh T H, Lin H, Liu J, Duan W, Bansil A, Fu L 2012 *Nat. Commun.* **3** 982
- [37] Ma S, Guo C, Xiao C, Wu F, Smidman M, Lu Y, Yuan H, Wu H 2018 *Adv. Funct. Mater.* **28** 1803188
- [38] Miao M S, Yan Q, van de Walle C G, Lou W K, Li L L, Chang K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 186803
- [39] Ueno K, Shimotani H, Yuan H, Ye J, Kawasaki M, Iwasa Y 2014 *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** 032001
- [40] Lei B, Wang N Z, Shang C, Meng F B, Ma L K, Luo X G, Wu T, Sun Z, Wang Y, Jiang Z, Mao B H, Liu Z, Yu Y J, Zhang Y B, Chen X H 2017 *Phys. Rev. B* **95** 020503
- [41] Amirtharaj P M, Pollak F H 1984 *Appl. Phys. Lett.* **45** 789
- [42] Tian Z, Garg J, Esfarjani K, Shiga T, Shionomi J, Chen G 2012 *Phys. Rev. B* **85** 184303
- [43] Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, O'Quinn B 2001 *Nature* **413** 597
- [44] Pei Y, LaLonde A D, Heinz N A, Snyder G J 2012 *Adv. Energy Mater.* **2** 670



SPECIAL TOPIC—In commemoration of the 100th anniversary of the birth of Kun Huang

# Recent progress on IV-VI compound semiconductor heterojunction two-dimensional electron gas<sup>\*</sup>

Ma Song-Song   Shu Tian-Yu   Zhu Jia-Qi   Li Kai   Wu Hui-Zhen<sup>†</sup>*(Department of Physics, State Key Laboratory of Silicon Materials, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)*

( Received 15 July 2019; revised manuscript received 12 August 2019 )

## Abstract

Semiconductor heterojunctions play a crucial role in exploring novel physics and developing advanced devices. Due to the characteristic electronic band structure, such as the narrow bandgap and the large spin-orbital interaction, the IV-VI compound semiconductor heterojunctions are not only of great importance to infrared detectors, but also arouse extensively concern in the frontier fields of physics, like topological insulators (TIs) and spintronics. Most excitingly, the two-dimensional electron gas (2DGE) with high electron density and high mobility is revealed at the interface of the typical IV-VI compound semiconductor CdTe/PbTe heterojunction, the formation of which is attributed to the unique twisted interface of the IV-VI compound semiconductor heterojunctions. Further researches demonstrate that the 2DEG system boasts prominent infrared photoresponse and is of Dirac fermion nature. This review presents the major progress in IV-VI compound semiconductor heterojunction 2DEG in the past decades. First, the formation mechanism of the twisted heterojunction 2DEG is discussed based on both theoretical and experimental results. By molecular beam epitaxy the novel lattice-mismatch heterostructure CdTe/PbTe with sharp interface was obtained and first-principle calculations revealed that the alternately changed atomic layer spacing played a crucial role in the formation of 2DEG. High resolution transmission electron microscope image of the interface clearly demonstrated the twisted interfacial structure and showed that the interfacial Te-sharing bonding configuration provided the excessive electrons. Second, we show the transport properties of the 2DEG under the condition of low temperature and high magnetic field, and the unambiguous  $\pi$  Berry phase of quantum oscillations indicate that the 2DEG is of Dirac fermion nature and demonstrate its potential for realizing two-dimensional TI and spintronic device. Moreover, the 2DEG exhibits quite high mobility, making it candidate for high electron mobility transistor. At last, the high-performance mid-infrared photodetector is displayed, which is built based on the typical IV-VI compound semiconductor CdTe/PbTe heterojunction. The most exciting feature of the detector is that it is able to achieve high-speed response with satisfying detectivity while working at room temperature, which could be a complementation to state-of-art mid-infrared photodetectors. In summary, the IV-VI compound semiconductor heterojunctions are of great significance not only in fundamental physics but also in device applications, and this review could provide the researchers with the main results in the field.

**Keywords:** IV-VI compound semiconductor heterojunctions, two-dimensional electron gas, Dirac fermions, infrared detectors

**PACS:** 68.35.bj, 71.10.Ca, 68.65.Fg, 73.40.-c

**DOI:** [10.7498/aps.68.20191074](https://doi.org/10.7498/aps.68.20191074)

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1737109) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [hzwu@zju.edu.cn](mailto:hzwu@zju.edu.cn)