

利用同步辐射光电子能谱技术研究 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜的能带移动及其组成异质结能带带阶

蔡春锋^{1,2*}, 彭曼丽¹, 翟继志¹, 毕岗¹, 张兵坡², 王森², 吴惠桢², 张文华³, 朱俊发³

(1. 浙江大学城市学院 信息与电气工程学院, 浙江 杭州 310015;

2. 浙江大学 物理系, 浙江 杭州 310027;

3. 中国科技大学 国家同步辐射实验室, 安徽 合肥 230029)

摘要: 利用同步辐射光电子能谱技术研究了低 Sr 组分时 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜能带的移动规律, 并计算了 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结中导带带阶所占比率. 当不考虑应力时, 该异质结界面导带带阶比率 $Q_c = \Delta E_c / \Delta E_g = 0.71$. 当考虑应力时, PbTe 能带发生 L 能谷与 O 能谷的劈裂, 其导带带阶比率分别为 $Q_c^L = 0.47$ 和 $Q_c^O = 0.72$. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结界面具有类型 I 的能带排列结构, 这说明 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 型量子阱或量子点对电子与空穴都有较强的限制能力. 该异质结能带带阶的精确测量有利于该类三元系半导体异质结在中红外光电器件的研发和应用中发挥重要作用.

关键词: 同步辐射光电子能谱; $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 异质结; 能带带阶

中图分类号: Q47 **文献标识码:** A

Band shift of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ thin film and its band alignment using synchrotron radiation photoelectron spectroscopy

CAI Chun-Feng^{1,2*}, PENG Man-Li¹, ZHAI Ji-Zhi¹, BI Gang¹, ZHANG Bing-Po²,
WANG Miao², WU Hui-Zhen², ZHANG Wen-Hua³, ZHU Jun-Fa³

(1. School of Information & Electrical Engineering, Zhejiang University City College, Hangzhou 310015, China;

2. Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China;

3. National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China)

Abstract: The valence band shift in $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ thin films with different Sr compositions was studied. The ratio of conduction band offset and valence band offset in this heterostructure has been determined. Without considering the strain effect, the conduction band offset ratio is $Q_c = \Delta E_c / \Delta E_g = 0.71$, and with considering the strain effect, the energy band of PbTe is degenerated into longitudinal and oblique valleys. The conduction band offset ratio for longitudinal valley is $Q_c^L = 0.47$ and for oblique valley is $Q_c^O = 0.72$, respectively. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ heterostructure has a type I alignment at the interface, which implies the confinement of both electrons and holes. The accurate determination of band alignment of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ heterostructure has great benefits in the research and development of mid-infrared opto-electronic devices.

Key words: synchrotron radiation photoelectron spectroscopy, $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ heterostructure, band offset

PACS: 73.20.At, 79.60.-I, 73.40.Lq

收稿日期: 2015-06-12, 修回日期: 2015-12-31

Received date: 2015-06-12, revised date: 2015-12-31

基金项目: 国家自然科学基金(61275108, 11374259), 浙江省自然科学基金(Z1110057, LY15F050009), 浙江省教育厅科研项目(Y201430784), 浙江大学城市学院教师科研基金(J-15011)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China(61275108, 11374259), Zhejiang Provincial Natural Science Foundation of China(Z1110057, LY15F050009), Foundation of Zhejiang Educational Committee(Y201430784), Zhejiang University City College Scientific Research Foundation(J-15011)

作者简介(Biography): 蔡春锋, (1985-), 男, 浙江萧山人, 博士, 主要从事半导体纳米材料制备与物性表征, 以及纳米光电器件研制等方向研究

* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: caicf@zucc.edu.cn

引言

IV-VI族半导体材料如 PbSe 和 PbTe 等具有一些独特的物理性质,如窄的直接带隙($\sim 0.3\text{eV}$),对称的能带结构,重空穴带的缺失,低的俄歇复合率,以及较大的介电常数等,使该类材料在中红外半导体光电器件的研制中具有巨大的应用潜力,对该类材料体系的研究也成为半导体材料研究领域中的一个重要方向^[1-2]. 比如低温工作(液氮温度)的 IV-VI 族半导体中红外激光器已经开始在医学诊断领域应用^[3]. 在 PbSe、PbTe 薄膜中掺入少量 Sr、Sn 等金属原子可以形成三元系合金,其能带带隙可以人为调控,同时晶格常数变化较小,与 PbSe、PbTe 能形成质量较好的异质结结构. 用该类三元系合金材料研制的中红外激光器与探测器的工作波长可以覆盖中红外波段($3\sim 30\mu\text{m}$)^[4]. PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe、PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe、PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe 等三元系合金构成的量子阱、量子点低维结构是 IV-VI 族半导体光电器件研究中的重要一类材料结构,研究该类异质结界面电子能带结构对于新型红外材料的功能研究、改进与应用具有重要的科学与实际意义^[5]. 半导体异质结界面能带带阶(两种材料组成界面的能带不连续量)直接影响该类异质结结构的量子限制效应以及电子态密度,对该参数的调控会有效改善器件性能,如降低阈值电流,提高器件工作温度等,因此界面能带带阶的精确测量与人为调控是半导体光电器件研究的一个重点内容^[6-10]. 目前对于该类三元系合金组成异质结的能带带阶主要采用光学测量结合理论计算的方法得到. Shen 等人^[9]测量了 Pb_{1-x}Sr_xSe/PbSe 多量子阱结构的红外光谱,并结合 6 带 k·p 模型拟合实验数据. 他们得到 PbSe/PbSrSe 量子阱界面导带带阶占比为 $(0.82\pm 0.03)\text{eV}$. Simma 等人^[11]采用红外差分透射光谱技术测量了 PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe 与 Pb_{1-x}Sr_xSe/PbSe 多量子阱中的子带跃迁能级,采用包络波函数结合 6 带 k·p 模型拟合实验数据得到该体系异质结的一些光电与能带参数. 他们给出的 PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe 和 Pb_{1-x}Sr_xSe/PbSe 异质结界面导带带阶比率分别为 $(0.45\pm 0.05)\text{eV}$ 和 $(0.60\pm 0.10)\text{eV}$. 对于 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 异质结,两者给出的结果存在较大的差异. 采用理论能带模型来拟合光学实验数据,由于需要拟合多个参数,拟合结果可靠性也需要进一步讨论. 该参数的不确定导致理论计算的结果容易出现较大的偏差,因此在实验上直接精确

测定 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe、PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe 等异质结界面能带带阶与 Sr 组分变化关系,对于深入理解三元系半导体材料的能带结构有重要意义^[12-13].

在本文中,首先利用分子束外延技术生长了不同 Sr 组分 Pb_{1-x}Sr_xTe 样品,然后利用透射光谱测量样品的光学带隙和介电常数等光学参数. 利用同步辐射光电子能谱测量各样品价带谱与芯态能级谱,研究低 Sr 组分的 Pb_{1-x}Sr_xTe 薄膜的能带移动与 Sr 组分之间关系,并且通过 PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe 异质结界面晶格失配与该材料体系的形变势等参数,理论上计算该类异质结界面的能带带阶变化规律.

1 实验

PbTe、Pb_{1-x}Sr_xTe 单晶薄膜采用固态源分子束外延设备(Solid source molecular beam epitaxy, MBE)外延生长. 该分子束外延设备配备三个腔体:进样室、预处理室和生长室,其中生长室本底气压为 $1.0\times 10^{-7}\text{Pa}$,衬底在多个腔室中逐级除气处理以避免表面二次污染和气体吸附. 在生长室配备了高纯度 PbTe 源,Te 源和 Sr 源等固态源用于掺杂以及三元系合金薄膜的生长(各源纯度高于 99.999%). 实验中采用与 PbTe 外延薄膜晶格匹配的 Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te (111) 和 BaF₂(111)单晶做为衬底材料. 在放入进样室之前,衬底表面先用溴甲醇化学抛光,并腐蚀表面氧化层、缺陷以及一些机械损伤等,然后在高真空环境中加热退火,进一步脱附表面吸附气体、修复晶格表面损伤. 由于 Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te 与 PbTe 具有非常相近的晶格常数($a_{\text{PbTe}}=6.462\text{Å}$, $a_{\text{CdTe}}=6.482\text{Å}$),因此能生长出高质量的 PbTe 单晶薄膜,关于生长细节在文献[14]有详细介绍. 生长室配备了反射高能电子衍射仪(Reflection high-energy electron diffraction, Rheed)实时监测衬底与外延层表面的结晶质量. 薄膜厚度通过 AMBIOS TECHNOLOGY 公司的 XP-1 型台阶轮廓仪测量. 红外透射光谱采用 Nicolet 公司生产的 Nexus670 型傅立叶变换红外光谱仪,光谱范围 $7400\sim 50\text{cm}^{-1}$,分辨率优于 0.1cm^{-1} .

同步辐射光电子能谱(Synchrotron radiation photoelectron spectroscopy, SRPES)在中国科技大学国家同步辐射实验室(NSRL)表面物理实验站开展. 该实验站配备多腔体的英国 Vacuum Generator (VG)多功能 UHV(超高真空)系统(ARUPS 10),具有快速进样室,预处理室,电子能谱分析室以及原位生长室等. 其中电子能谱分析室本底气压维持在 1

$\times 10^{-8}$ Pa 以下, 保证样品表面始终保持洁净. 在电子能谱分析室配备了英国 VG 公司研制的 ARUPS10 半球形分析器, Ar 离子枪, X 射线管, 低能电子衍射仪 (LEED) 等仪器用于样品表征和表面处理. 同步辐射光源覆盖能量从 10 eV 到 300 eV 连续可变, 出射光子的能量分辨率 ($E/\Delta E$) 高于 1000. 更多的有关该实验站的信息在其他文献中有详细描述^[15].

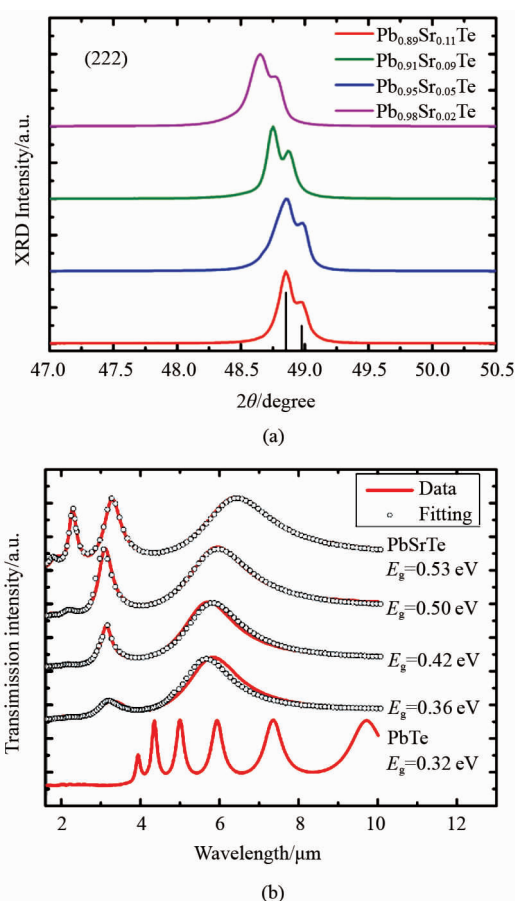


图 1 (a) $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜 (222) 晶面的 XRD 衍射图, (b) 不同 Sr 组分 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜样品的红外透射谱. 图中实线为实验数据, 空心圆圈为拟合结果, 所得带隙在图右侧标明
Fig. 1 (a) (222) XRD diffraction spectra of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ thin film with different Sr compositions, (b) FT-IR spectra of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ thin film with different Sr component (solid lines) and its theoretical fitting results (circles). The fitting results are indicated in the right

2 实验结果与讨论

图 1 中 (a) 为 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜 (222) 晶面的衍射峰, (b) 为不同 Sr 组分 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 样品的红外透射谱以及拟合曲线. 图 1 (a) 中出现的双峰结构是由于 X 射线衍射仪 (X-ray diffraction) XRD 采用的 X 射线

源包含 $\text{Cu } \text{k}\alpha_1$ 和 $\text{k}\alpha_2$ 两条特征线. 随着 Sr 组分增加, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜光学带隙变宽, 晶格常数变大, 相应的红外光谱吸收边发生明显蓝移, XRD 衍射峰向左移动. 根据 Vigard 定理, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 的晶格常数为 PbTe 晶格常数 $a_{\text{PbTe}} = 6.462 \text{ \AA}$ 与 SrTe 晶格常数 $a_{\text{SrTe}} = 6.660 \text{ \AA}$ 的线性插值^[16]: $a_{\text{PbSrTe}} = 6.462 + 0.198x (\text{\AA})$. 我们通过 XRD 谱中衍射峰峰位计算 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜样品的晶格常数, 进而得到 Sr 的组分信息. 由于 IV-VI 材料折射率较大, 光线在薄膜中经过多次反射而在透射谱上形成了法布里-珀罗 (F-P) 干涉峰. 为了精确确定薄膜的光学带隙, 采用薄膜光学的基本理论对透射光谱数据进行拟合. 具体的拟合理论和过程在早期工作中已经有详细介绍, 经过拟合可以得到薄膜光学带隙与折射率等参数^[17]. 图 1 (b) 中实线为测得的红外透射谱数据, 空心圆圈为理论拟合结果. 红外透射数据测量时采用 BaF_2 作为衬底材料, 因为 BaF_2 衬底在红外波段吸收较小. 具体测量过程是分两次测量 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{BaF}_2$ 与 BaF_2 衬底的红外透射谱, 然后通过两个谱线相比, 从而得到 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜的红外透射数据. 从图中可以看出各样品实验数据与理论拟合吻合的都较好. 通过理论拟合得到的各样品的带隙值已标在相应谱线右侧. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 中的能带带隙随 Sr 组分增加而变大, 并具有相互对应关系. Sr 组分同 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 带隙之间存在一个多项式关系^[11] ($T = 300 \text{ K}$):

$$E_g = 0.32 + 1.96x \quad (1)$$

其中, x 为 Sr 的组分大小. 根据 XRD 衍射数据和上面的拟合公式, 得到各 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜样品对应 Sr 的组分与能带带隙, 如表 1 所示.

表 1 测量得到的相应 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜的带隙值以及 Sr 组分

Table 1 The band gap and Sr composition of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ thin films

样品	No.1	No.2	No.3	No.4	No.5
E_g/eV	0.32	0.36	0.42	0.50	0.53
Sr/(%)	0	2	5	9	11

利用光电子能谱技术测量异质结能带带阶是目前被广泛采用的测量方法, 其测量原理在文献 [18]、[19] 中有详细描述. PbTe 材料带隙较小, 具有较高载流子浓度, 因此具有较好的导电性. 为了进一步减小光电子能谱测试过程中表面荷电的影响, 每个样品表面通过金属钢与仪器电学导通, 同时在样品表面某一位置贴一金箔, 所有谱线都采用 $\text{Au}4f_{7/2}$ 芯态

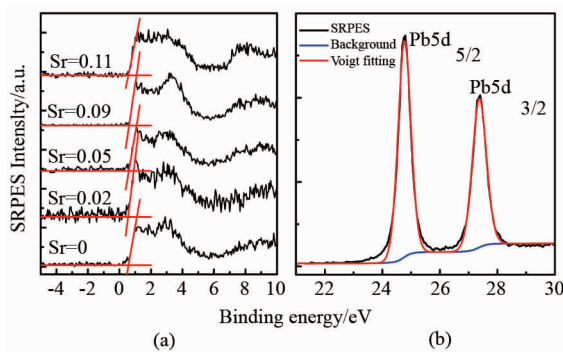


图2 不同 Sr 组分 $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 薄膜样品的 (a) 价带谱, (b) $Pb5d_{5/2}$ 芯态能级谱
Fig. 2 The valence band spectra (a) and $Pb5d_{5/2}$ corelevel spectra, (b) of $Pb_{1-x}Sr_xTe$ thin films

能级与费米边进行定标. 光电子能谱对样品表面非常敏感, 样品表面氧化层、吸附气体以及任何的污染都会对结果产生影响. 在进行光电子能谱测量前, 先用 Ar 离子枪对样品表面进行清洁. 为了减小 Ar 离子轰击对材料晶体质量的破坏, 清洁过程中 Ar 离子枪的加速电压从 3 kV 逐渐调整到 1 kV, 直至在 XPS 中观察不到 O1 s 峰, 最后样品在 200°C 退火 30 min.

图2中(a)为 $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 样品价带谱, (b)为 $Pb5d$ 芯态能级谱. 在实验中采用能量为 75 eV 的紫外光子作为光电子能谱入射光源, 因为该能量的光子对 $PbTe$ 体系材料的价带谱和芯态能级都具有最大的散射截面, 有利于提高测量精度. $Pb5d$ 芯态能级峰位的确定采用 Shirley 函数扣除背景, 然后用 Voigt 线型函数拟合芯态能级峰的方法获得, 如图2(b)所示. 价带顶位置的确定采用切线方法得到: 做两条直线, 一条直线与价带边相切, 另一条直线为能谱的背景计数, 两条直线的交点即为价带顶的位置. 该方法能有效消除由于能量分析器的分辨率以及入射光子的展宽而造成的谱线展宽^[20]. 测量结果的不确定度采用多次拟合得到, 所得数据已列在表2中.

表2 $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 薄膜价带与导带移动与 Sr
Table 2 The valence band and conduction band shifts of $Pb_{1-x}Sr_xTe$ thin films

样品	No.1	No.2	No.3	No.4	No.5
Sr 组分	PbTe	$Pb_{0.98}Sr_{0.02}Te$	$Pb_{0.95}Sr_{0.05}Te$	$Pb_{0.91}Sr_{0.09}Te$	$Pb_{0.89}Sr_{0.11}Te$
$\Delta E_V / (eV)$	0.03 ± 0.05	0.01 ± 0.05	0.05 ± 0.05	0.04 ± 0.05	0.10 ± 0.05
$\Delta E_C / (eV)$	0.29 ± 0.05	0.35 ± 0.05	0.37 ± 0.05	0.46 ± 0.05	0.43 ± 0.05

图3为 $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 薄膜价带顶和导带底随 Sr 组分增加的变化规律. 随着 Sr 组分增加, $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 的

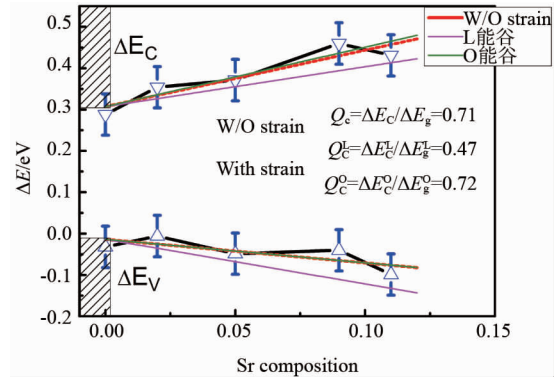


图3 $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 薄膜价带顶和导带底随 Sr 组分增加的移动情况. 图中三角形为数据点, 测量误差为 ± 0.05 eV, 红色虚线为根据最小二乘法得到的拟合曲线. 图中粉色和绿色实线分别代表了考虑应力之后 $Pb_{1-x}Sr_xTe/PbTe$ 异质结界面 L 能谷与 O 能谷的能带带阶
Fig. 3 The shift of valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM) of $Pb_{1-x}Sr_xTe$ thin films with different Sr compositions. The triangle is the experimental data, and the red line is the fitting line. The pink and green lines are the band offsets of L and O valley at the interface of $Pb_{1-x}Sr_xTe/PbTe$ heterostructure with strain, respectively

能带带隙会变大, 价带顶与导带底分别向两侧移动. 通过最小二乘法对数据进行线性拟合, 得到 $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 价带顶随 Sr 组分的变化规律, 如图中红色虚线所示:

$$\Delta E_V = 0.014 + 0.569x \text{ (eV)} \quad (2)$$

相应导带底的变化规律为:

$$\Delta E_C = 0.307 + 1.365x \text{ (eV)} \quad (3)$$

根据最小二乘法拟合, 价带顶和导带底数据与 Sr 组分的线性相关系数为 $r = 0.77$, 具有较好的线性相关性. $Pb_{1-x}Sr_xTe$ 导带顶的上移速率要大于价带底的下移速率, 这说明在 $Pb_{1-x}Sr_xTe/PbTe$ 异质结中, 导带带阶与价带带阶不是对称的. 由导带底与价带顶随 Sr 组分变化的拟合直线的斜率, 可以得出在理想 $Pb_{1-x}Sr_xTe/PbTe$ 异质结中(界面没有应力存在时), 导带带阶占总带隙差的比率 $Q_c = \Delta E_C / \Delta E_g = 0.71$.

$Pb_{1-x}Sr_xTe/PbTe$ 形成异质结后(量子阱、量子点结构), 由于两者晶格常数不同, 因此阱层 $PbTe$ 晶格发生畸变, 导致 $PbTe$ 的能带结构发生变化. $PbTe$ 等 IV-VI 族半导体材料具有多能谷的能带结构, 其能带极值位于布里渊区的 L 能谷. 薄膜在应力作用下, 能谷会发生分裂, 比如对于 (111) 晶面取向的 $PbTe$ 薄膜, 能谷分裂成斜向能谷 (O) 和纵向能谷 (L). $Pb_{1-x}Sr_xTe/PbTe$ (111) 量子阱中, $PbTe$ 面内的

晶格失配为:

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\text{PbSrTe}} - a_{\text{PbTe}}}{a_{\text{PbTe}}} = \frac{0.198x}{6.462} \quad (4)$$

面外晶格失配为:

$$\varepsilon_{\perp} = -2(C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}) / (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}) \varepsilon_{\parallel} \quad (5)$$

其中 C_{ij} 为 PbTe 材料的弹性常数, 引用文献[21]. 晶格应力会改变能带结构, 并使 O 能谷能带带隙与 L 能谷能带带隙发生分裂, 其分裂能量存在如下关系^[22]:

$$\delta E_{\text{L}}^{c,v} = D_{\text{d}}^{c,v}(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) + D_{\text{u}}^{c,v}\varepsilon_{\perp} \quad (6)$$

$$\delta E_{\text{O}}^{c,v} = D_{\text{d}}^{c,v}(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}) + D_{\text{u}}^{c,v}(8\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})/9 \quad (7)$$

其中, $\delta E_{\text{C},\text{V}}^{\text{L},\text{O}}$ 分别为由于应力引入的 O 能谷与 L 能谷中导带与价带移动量, $D_{\text{C},\text{V}}^{\text{d},\text{u}}$ 为 PbTe 材料的形变势^[11]. 由此, 得到考虑 PbTe 薄膜受到应力之后, O 能谷与 L 能谷能带的移动分别为:

$$\text{L 能谷} \begin{cases} \Delta E_{\text{V}}^{\text{L}} = 0.014 + 1.078x \text{ (eV)} \\ \Delta E_{\text{C}}^{\text{L}} = 0.307 + 0.965x \text{ (eV)} \end{cases} \quad (8)$$

$$\text{O 能谷} \begin{cases} \Delta E_{\text{V}}^{\text{O}} = 0.014 + 0.571x \text{ (eV)} \\ \Delta E_{\text{C}}^{\text{O}} = 0.307 + 1.438x \text{ (eV)} \end{cases} \quad (9)$$

考虑 PbTe 薄膜由应力产生的能带移动, 以及能谷劈裂, L 能谷的导带带阶比 $Q_{\text{C}}^{\text{L}} = \Delta E_{\text{C}}^{\text{L}} = \Delta E_{\text{g}}^{\text{L}} = 0.47$, O 能谷的导带带阶比 $Q_{\text{C}}^{\text{O}} = \Delta E_{\text{C}}^{\text{O}} / \Delta E_{\text{g}}^{\text{O}} = 0.72$.

采用 SRPES 实验方法对半导体异质结界面能带排列情况进行精确的测定, 有利于在理论上更深入理解该类型异质结结构的光电性质. 根据所得结果, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结界面具有类型 I 的能带结构, 导带带阶要大于价带带阶, 说明该类异质结对导带电子的限制作用要大于对价带空穴的限制作用. 当考虑 PbTe 层受到应力时, L 能谷的导带带阶占比与 M. Simma 等^[11] 所得结果吻合. 该研究小组得到 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结界面导带带阶占比为 $Q_{\text{C}} = 0.45 \pm 0.05$. 可见在 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 三元系异质结结构中, 应力对界面能带结构会产生重要影响. 异质结中存在的其他界面效应对能带结构有很大的影响, 比如界面费米能级钉扎效应、界面态效应等^[23], 在实际应用中都需要根据具体情况作适当的修正. 同时也说明为了更深入理解异质结界面能带特征, 仍旧需要进行大量的实验测量和理论验证.

3 结论

采用光电子能谱技术测量了低 Sr 组分时 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}$ 薄膜能带移动与 Sr 组分关系, 并结合理论计

算 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结能带带阶. 当不考虑 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 界面存在应力时, 该异质结界面导带带阶占比. 当考虑界面应力时, PbTe 能带发生 L 能谷与 O 能谷的劈裂, 其导带带阶占比分别为和. $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结界面具有类型 I 的能带排列结构, 这说明 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 型量子阱或量子点中, 对电子与空穴都有较强的限制能力. 对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Te}/\text{PbTe}$ 异质结能带带阶的精确测量有利于该类三元系半导体异质结在中红外光电器件的研发和应用中发挥重要作用.

References

- [1] CAO Chun-Fang, WU Hui-Zhen, SI Jian-Xiao, *et al.* Abnormal Raman spectra of PbTe crystalline thin films grown by molecular beam epitaxy [J]. *Acta Phys. Sin.* (曹春芳, 吴惠贞, 斯剑霄, 等. 分子束外延 PbTe 单晶薄膜的反常拉曼光谱研究. *物理学报*), 2006, **55**(4): 2021 - 2026.
- [2] XIA Ming-Long, WU Hui-Zhen, SI Jian-Xiao, *et al.* Optical properties of diluted magnetic $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ epitaxial films [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (夏明龙, 吴惠贞, 斯剑霄, 等. $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ 稀磁半导体外延薄膜的光学特性. *红外与毫米波学报*), 2007, **26**(4): 261 - 264.
- [3] Namjou K, Roller C B, McCann P J. The Breathmeter-A new laser device to analyze your health [J]. *IEEE CIRCUITS & DEVICES*, 2006, **22**(5): 22 - 28.
- [4] Yasuda A, Suto K, Nishizawa J. Lasing properties of Pb-SnTe/PbTe double hetero mid-infrared laser diodes grown by temperature difference method under controlled vapor pressure liquid-phase epitaxy [J]. *Mater. Sci. Semicond. Process*, 2014, **27**: 159 - 162.
- [5] CAI Chun-Feng, WU Hui-Zhen, SI Jian-Xiao, *et al.* Mid-infrared photoluminescence study of PbSe/PbSrSe multiple quantum wells grown by molecular beam epitaxy [J]. *Acta Phys. Sin.* (蔡春锋, 吴惠贞, 斯剑霄, 等. MBE 生长 PbSe/PbSrSe 量子阱结构的光致中红外发光的研究. *物理学报*), 2009, **58**(5): 688.
- [6] Xu T N, Wu H Z, Si J X. Optical transitions in PbTe/CdTe quantum dots [J]. *Phys. Rev. B*, 2007, **76**(15): 155328-1-9.
- [7] XU Tian-Ning, WU Hui-Zhen, SI Jian-Xiao, *et al.* Evolution of micro-structures on PbSe buffer layer and self-organization of PbTe QDs [J]. *Chin. J. Semi.* (徐天宁, 吴惠贞, 斯剑霄, 等. PbSe 缓冲层表面微结构的演化及 PbTe 量子点的制备. *半导体学报*). 2006, **27**(S): 87 - 91.
- [8] Mccann P J, Namjou K, Fang X M. Above-room-temperature continuous-wave mid-infrared photoluminescence from PbSe/PbSrSe quantum wells [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(23): 3608 - 3610.
- [9] Shen W Z, Wang K, Jiang L F, *et al.* Study of band structure in PbSe/PbSrSe quantum wells for midinfrared laser applications [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **79**(16): 2579 - 2581.
- [10] Wu H Z, Dai N, McCan P J. Experimental determination of deformation potentials and band nonparabolicity parameters for PbSe [J]. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**: 045303.

(下转第 226 页)

