

Pb_{1-x}Sn_xTe 材料等离子体反射边 的温度漂移现象

冷 静 杨永年 袁诗鑫

(中国科学院上海技术物理研究所)

摘要——本文报道对 Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te 单晶以及 *p*-PbSnTe/*p*⁺-PbSnTe 和 *n*-PbTe/*p*-PbSnTe/*p*⁺-PbSnTe 液相外延层进行观察得到的等离子体 (Plasma) 反射边的温度漂移现象。认为这是由于电极化有效质量 m_s 和散射弛豫时间 τ 共同影响的结果, 其中 m_s 随温度的升高而变大, 起着主要的作用。本文最后对浓度为 $1.45 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ 的单晶样品进行了模拟计算, 在计算光谱与实验光谱达到一致的情况下, 得到了 m_s , τ 随温度的变化曲线。

一、引 言

目前, 对于 Pb_{1-x}Sn_xTe 材料的红外等离子体反射光谱已开展了广泛的研究^[1]。其原理是, 当入射光的频率 $\omega = \omega_{\min}$ 时, 反射率出现极小值, 即

$$dR/d\omega_{\omega=\omega_{\min}} = 0, \quad (1)$$

利用由空气至半导体材料的垂直入射的反射率公式, 将式(1)变为:

$$(\epsilon' - 1) \frac{dn}{d\omega} + \epsilon'' \frac{d\kappa}{d\omega} \Big|_{\omega=\omega_{\min}} = 0, \quad (2)$$

其中 n , κ 分别为折射率和消光系数, ϵ' 和 ϵ'' 分别为介电函数 ϵ 的实部和虚部。

$$\epsilon = \epsilon_{\infty} \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - i/\tau)} \right] \quad (3)$$

其中 $\omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{\epsilon_{\infty} m_s}$ 称为等离子体振荡频率。由式(2)(3)便可得到反射率极小所对应的频率 ω_{\min} 与等离子体振荡频率 ω_p 的关系, 而 ω_{\min} 可以由实验得到, 从而可以确定 N/m_s 。

然而由于 N (载流子浓度), τ (散射弛豫时间), ϵ_{∞} (高频介电常数), m_s (电极化有效质量) 都可能与温度有关, 故 ω_{\min} 也是与温度有关的。1972年曾有人观察到对于浓度为 $10^{18}/\text{cm}^3$ 的 Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te 样品的这种温度漂移现象^[2], 1975年又进一步讨论了等离子体 (Plasma) 反射边与温度相关的原因^[3]。本文报道了, 对 Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te 单晶以及 *p*-PbSnTe/*p*⁺-PbSnTe 和 *n*-PbTe/*p*-PbSnTe/*p*⁺-PbSnTe 液相外延层, 都观察到了这种温度漂移

现象, 并对浓度为 $1.45 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ 的单晶样品进行了模拟计算, 所得到的 m_s, τ 与温度 T 的关系和前人的结果进行了比较, 总的趋势是一致的, 但浓度不同, 变化的幅度也有差异。

二、实验结果和分析

用一台 IFS-113 型红外傅立叶光谱仪对表 1 中的四个样品进行了测量, 实验发现, 无论对 p 型或 n 型材料, 无论对均匀单晶或非均匀的外延片, 其等离子体反射边都随温度明显地变化, 如图 1—4 所示。而且规律是一样的, 即随温度的升高, ν_{\min} (与 ω_{\min} 对应的波数) 向小的方向偏移, 同时 R_{\min} 变大, 极小值变得不明显。由图 1—4 还可以看出, 浓度越高, ν_{\min} 随温度 T 的偏移就越显著, 以 S-2 号样品为例, $N = 1.45 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 在 77—200 K 之间, ν_{\min} 的漂移达 6%。图 3 和图 4 是外延样品的反射光谱, 所以在第一个 ν_{\min} 后还出现了干涉条纹。

表 1 四种样品的 ν_{\min} 与温度的关系

| 样 品 | 浓 度 (cm^{-3}) | ν_{\min} (cm^{-1}) | | | |
|--|-----------------------------|-----------------------------------|-------|----------------|----------------|
| | | 77 K | 100 K | 200 K | 300 K |
| S-2 $p\text{-Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Te}$ 单晶 | 1.45×10^{19} | 685 | 677 | 644 | 550 |
| S-3 $p\text{-Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Te}$ 单晶 | $> 2.5 \times 10^{19}$ | — | 839 | 791 | 708 |
| E-4 外延片 $p\text{-PbSnTe}/p^+\text{-PbSnTe}$ | 2×10^{17} | 151 | — | — | 129 (295 K) |
| E-5 外延片 $n\text{-PbTe}/p\text{-PbSnTe}/p^+\text{-PbSnTe}$ | -2×10^{17} | 131.6 (80 K) | — | 125 (195 K) | 122 (298 K) |

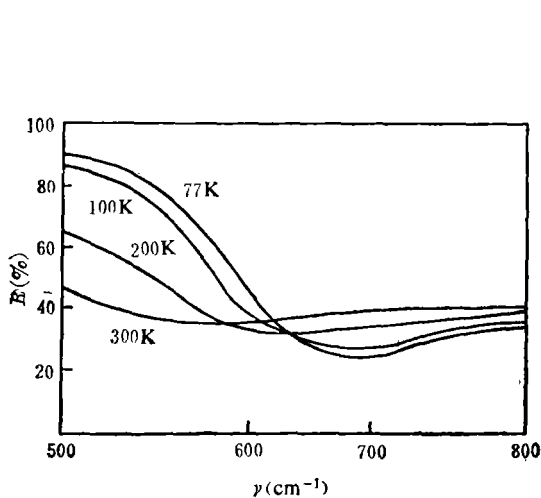


图 1 样品 S-2 的实验光谱

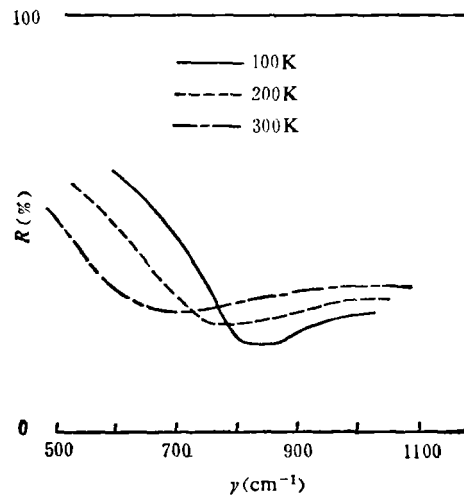


图 2 样品 S-3 的实验光谱

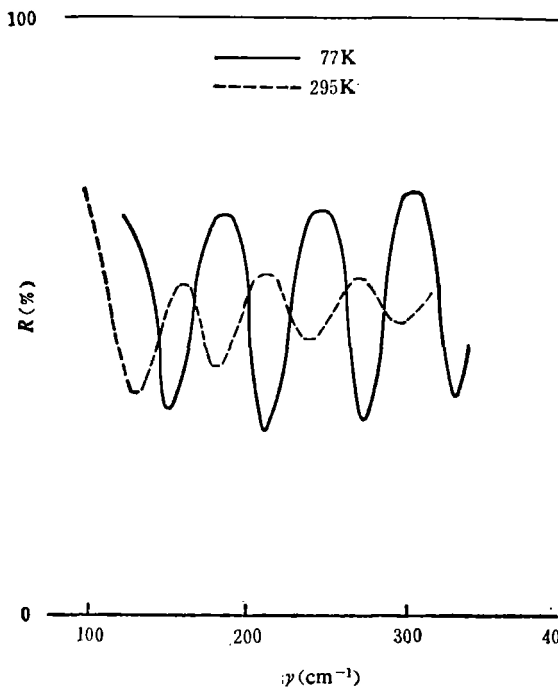


图3 样品 E-4 的实验光谱

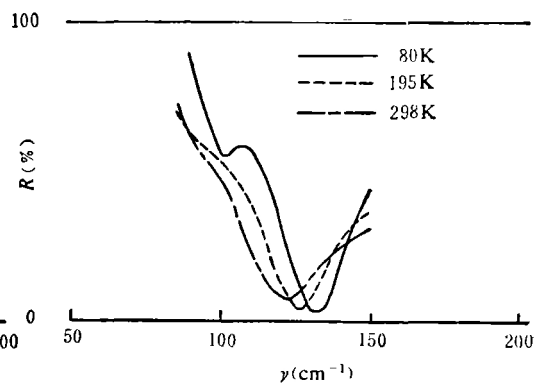


图4 样品 E-5 的实验光谱

ν_{\min} 的温度漂移观察不能用 N 、 τ 或 ϵ_{∞} 的变化来解释, 因为:

1. 霍尔测量已经证明, N 与 T 是无关的^[3], 因为对 $\text{P-Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Te}$ 来说, $N > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 已是高简并材料;

2. 实验也已证明, ϵ_{∞} 随温度的变化关系并不明显^[2];

3. τ 是散射弛豫时间, 应随温度的上升而下降, 因而 $G \left(= \frac{1}{2\pi c\tau} \right)$ 应随温度上升而增大, 经用以下三式:

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad (4)$$

$$\begin{cases} n = \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} + \epsilon')} \\ \kappa = \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon')} \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} \epsilon' = \epsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\nu_p^2}{\nu^2 + G^2} \right) \\ \epsilon'' = \epsilon_{\infty} \frac{G}{\nu} \frac{\nu_p^2}{\nu^2 + G^2} \end{cases} \quad (6)$$

算得的计算光谱表明, 由于 G 的增大 (即 T 的增加), ν_{\min} 向高波数方向移动, 如图 5 所示。当 m_s 不变, 而 G 由 100 cm^{-1} 增加到 300 cm^{-1} 时, ν_{\min} 由 710 cm^{-1} 变到 770 cm^{-1} , 这与实验观察到的结果恰恰相反, 显然还有一个随温度的增加而使 ν_{\min} 减小的因素, 且它的“减小”作用要比 G 的“增大”作用更为显著。这就是电极化有效质量 m_s 。

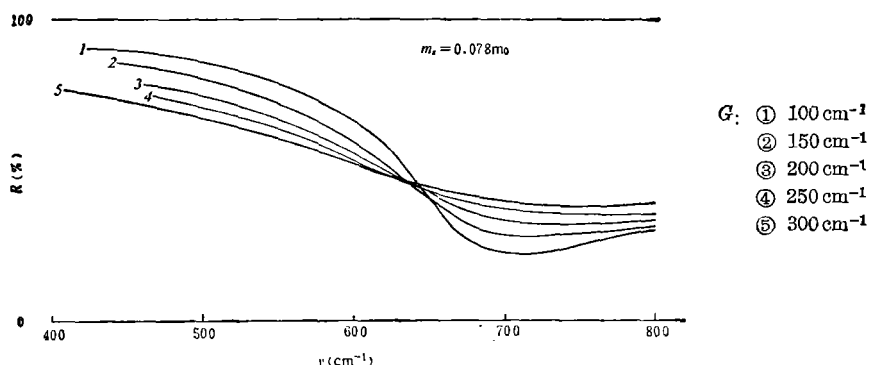


图5 计算光谱(G 与 ν_{\min} 的关系)

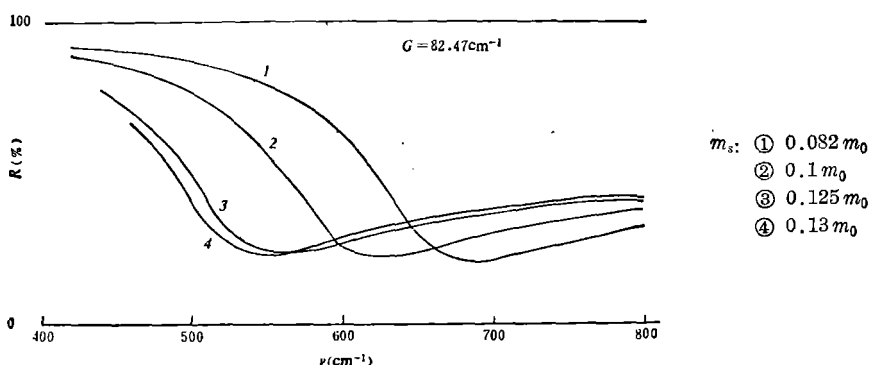


图6 计算光谱(m_s 与 ν_{\min} 的关系)

由上述同样的计算表明, 当 m_s 增加时, ν_{\min} 确实向小的方向漂移(如图6所示)。例如当 m_s 由 $0.082 m_0$ 增加到 $0.13 m_0$ 时, ν_{\min} 由 680 cm^{-1} 减小到 550 cm^{-1} , 比 G 的影响确实要显著得多。

根据电极化有效质量与能带的关系^[3]:

$$\frac{1}{m_s} = \frac{-4}{3\hbar^2(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{\partial f_0}{\partial E} \times \left(\int_0^{k_L \max} dk_L \cdot \frac{|\nabla_k E|^2 \cdot kT}{|(\nabla_k E)_T|} \right)_E dE \quad (7)$$

可以看出, m_s 与能带结构有关。按照 Ramage J. C. 等人^[4]的理论, m_s 可由一特征能量 $E' = E_g + 2E_F$ 来确定, 而 E_g (禁带宽度) 和 E_F 都是温度的函数, 故 m_s 亦是与温度相关的, 至于 m_s 与 E' 关系的解析表达式, 需由具体给出的能带模型确定, 但其趋势是一致的, 即随温度升高, m_s 亦变大。

上述分析对图3和图4所示的情形是不够的, 因为这两个样品外延层中载流子浓度较低, 其第一个 ν_{\min} 的位置已与纵光学声子的波数十分接近, 这时, 等离子体和声子的耦合作用较强, 所以还必须考虑声子基频的温度漂移影响, 本文则不做这方面的研究和探讨了。

三、模拟计算

作者对图1所示的 S-2 样品的实验光谱进行了计算模拟, 其结果如图7所示, 将两者

进行比较即可看出, 它们的拟合是良好的。计算光谱所采用的参数列于 2 中。图 8 和图 9 分别给出了模拟计算参数随温度变化的曲线。

表 2 计算参数(S-2 样品 $N=1.45 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$)

| 温 度 (K) | m_s/m_0 | $G(\text{cm}^{-1})$ | $\tau = \frac{1}{2\pi CG} \text{ (sec)}$ |
|---------|-----------|---------------------|--|
| 77 | 0.081 | 95 | 5.7×10^{-14} |
| 100 | 0.084 | 110 | 4.8×10^{-14} |
| 200 | 0.100 | 170 | 3.1×10^{-14} |
| 300 | 0.125 | 200 | 2.7×10^{-14} |

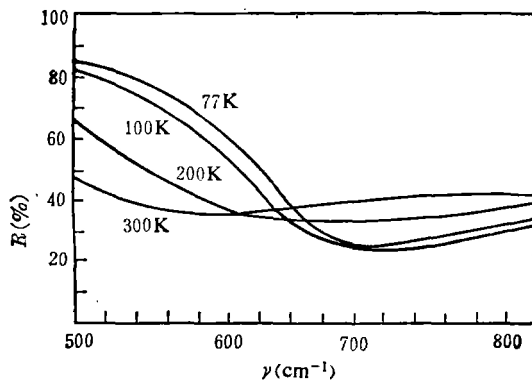


图 7 S-2 样品的模拟计算光谱

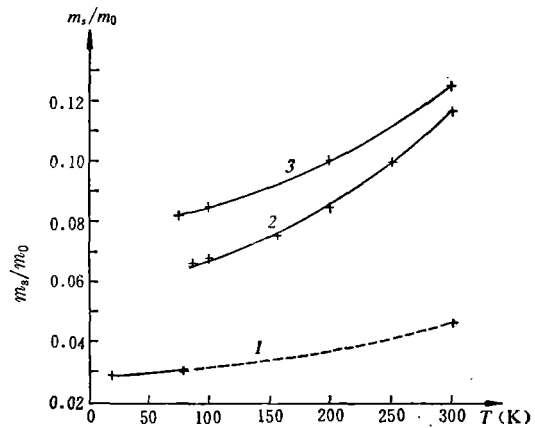


图 8 m_s-T 的变化关系

1. Ramage^[3] 的结果 ($2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$);
2. Dionne^[2] 的结果 ($8.68 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$);
3. 本实验结果 ($1.45 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$)

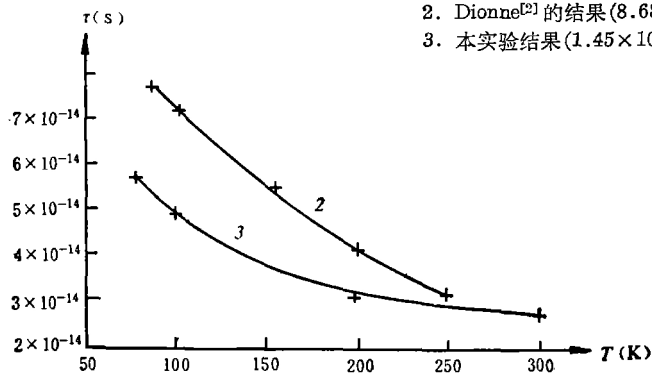


图 9 $\tau-T$ 的变化关系

2. Dionne 的结果 ($8.68 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)
3. 本实验结果 $1.45 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

四、结 论

1. 对于浓度 $\geq 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ 材料, 实验上均观察到其等离子体反射边

随温度的漂移现象,且其规律是,随温度升高, ν_{\min} 变小, R_{\min} 变大。样品的载流子浓度越高,这种漂移越明显。

2. 引起温度漂移的原因,是 m_s 与 G 共同影响的结果,温度升高, m_s 增加,并使 ν_{\min} 变小,而同时,温度增加, G 也增加,它使 ν_{\min} 变大,但 m_s 的作用要比 G 明显,起着主要作用。

3. 理论上, m_s 随温度的变化规律应由具体的能带模型($E-k$ 关系)予以计算,浓度不同,其变化的趋势一致,但变化幅度有差异。

致谢——本工作得到汤定元教授的指导,并听取了方俊鑫教授的宝贵意见;样品由本所 150 组提供,作者得到该组全体同志的大力支持;光谱实验是在复旦大学物理二系激光化学研究室于敏、刘先年、金凤梯等老师的帮助下完成的,在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] 冷静,杨永年,袁诗鑫,半导体学报,3(1982), 3, 182.
- [2] Dionne G. & Wolly J. C., *Phys. Rev. B*, 6(1972), 10: 3898.
- [3] Ramage J. C. et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 8(1975), 1918.
- [4] Ramage J. C. et al., *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 8(1975), 1731.

THE SHIFT OF THE PLASMA REFLECTION EDGES OF $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ WITH TEMPERATURE

LENG JING, YANG YONGNIAN, YUAN SHIXIN
(Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The shift with temperature of the plasma reflection edges of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$, $p\text{-PbSnTe}$ / $p^+\text{-PbSnTe}$ and $n\text{-PbTe}/p\text{-PbSnTe}/p^+\text{-PbSnTe}$, observed in experiments, is reported. Two things account for the phenomenon, the susceptibility effective mass m_s and the scattering time τ . The former plays an important part, because m_s increases with the temperature. the authors apply the curve-fitting technique to $\text{Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Te}$ ($N=1.45 \times 10^{19}/\text{cm}^3$). Under the condition that the calculated curves are in agreement with the experimental spectra, the temperature dependences of m_s and τ are obtained.