

Hg_{0.656}Cd_{0.344}Te 本征吸收光谱和 Kane 模型

褚 君 浩

(中国科学院上海技术物理研究所)

摘要——本文描述在 80 K 到 300 K 温度范围, 利用 PE580B 型红外分光光度计测量厚度为 6.5 μm 的 Hg_{0.656}Cd_{0.344}Te 薄样品的本征吸收光谱。测得最高吸收系数达 10⁴ cm⁻¹。由吸收曲线确定了该样品在不同温度下的禁带宽度以及吸收边所符合的规律, 与参考文献 [3] 的经验公式一致。本文还利用 Kane 模型计算了吸收系数的理论曲线, 取动量矩阵元 $P=8 \times 10^{-8}$ eV-cm, 重空穴有效质量 $m_{hh}=0.55 m_0$ 时, 理论曲线与实验曲线符合较好。但 Kane 理论不能解释吸收边。根据指数吸收边可以推测, 在导带底存在一个指数型带尾。

一、引 言

Hg_{1-x}Cd_xTe 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^[1-3]。作者在过去的工作^[3]中, 制备了厚度在 10 μm 以下的薄样品, 从而测得高达 5000 cm⁻¹ 的吸收系数, 吸收光谱出现了明显的转折, 可以较为准确地确定 E_g , 从而得到一个较好的禁带宽度经验公式。但由于测量所用仪器是 PE577 型红外分光光度计, 能测量的最小透过率为 0.5% 左右, 因而最大吸收系数仅测到 5000 cm⁻¹, 吸收曲线转弯后的部分还较短, 在与 Kane 模型的计算结果相比较时, 较为粗糙。本工作进而利用 PE580B 型红外分光光度计作测量, 由于在同样测量条件下, 其精度比 577 型大为提高, 透过率测量精度可达 10⁻⁴, 因而可以测得更高的吸收系数, 延长了吸收曲线转弯后的长度, 这样就可以比较精确地与 Kane 模型理论计算曲线相比较, 从曲线最佳符合可以较好地测定动量矩阵元 P 的数值。

二、实验方法和结果

采用透射法测量吸收系数 α , 一般按照下列关系式:

$$\langle T \rangle = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}}, \quad (1)$$

其中, $\langle T \rangle$ 是考虑多次内反射后透过率的平均值, d 是样品厚度, R 是厚样品反射率, 在 $\alpha \ll 10^4$ cm⁻¹ 的条件下, 可以用

本文 1982 年 9 月 18 日收到。

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

计算^[1], 其中 $n = \sqrt{\epsilon_\infty}$, ϵ_∞ 为样品高频介电系数, 对不同组分 x 的样品, ϵ_∞ 值取自参考文献 [4]。但式 (1) 仅适用于单层样品。如果样品直接粘接在衬底上, 则光通过样品-胶-基底结构的总透过率可以写为^[3]

$$\langle T_t \rangle = \frac{(1-R_{as})(1-R_{so})e^{-\alpha_s d_s}}{1-R_{as}R_{so}e^{-2\alpha_s d_s}} \cdot \frac{(1-R_{sc})(1-R_{cb})e^{-\alpha_c d_c}}{1-R_{sc}R_{cb}e^{-2\alpha_c d_c}} \cdot \frac{(1-R_{cb})(1-R_{bo})e^{-\alpha_b d_b}}{1-R_{cb}R_{bo}e^{-2\alpha_b d_b}}, \quad (3)$$

下标 a, s, c 和 b 分别表示空气、半导体样品、粘结剂和基底。利用上式的简化式子并另外测出 $e^{-\alpha_c d_c}$ 以后, 可以根据 $\langle T_t \rangle$ 计算样品的吸收系数 α 。

本实验采用半熔法生长的 HgCdTe 单晶样品, 用范德堡法测得其 77 K 下载流子浓度为 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 根据称重法以及扫描电镜检测等方法, 测得样品组分为 $x = 0.344 (\pm 0.003)$ 。样品用胶粘接在宝石片衬底上, 采用研磨、抛光和腐蚀的办法把样品减薄到 $6.5 \mu\text{m}$ 左右。样品厚度用干涉显微镜测量。

本实验采用 PE580B 型红外分光光度计测量样品在不同温度下的透过率, 既描出透过率曲线, 又由计算机打印出不同波数处所对应的透过率值, 透过率测量精度为万分

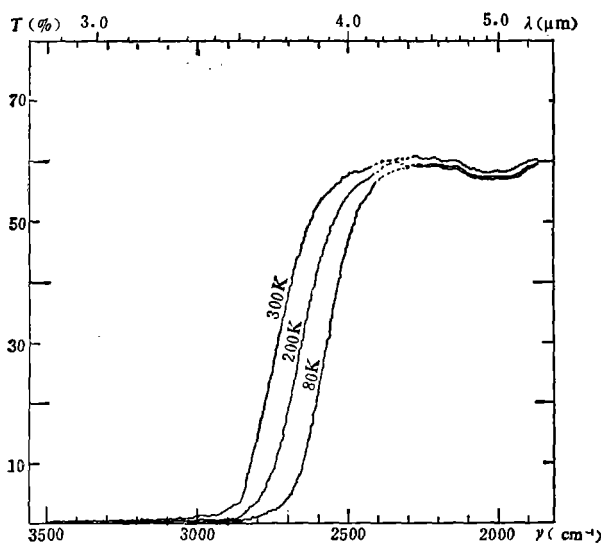


图 1 厚度为 $6.5 \mu\text{m}$ 的 $\text{Hg}_{0.66}\text{Cd}_{0.34}\text{Te}$ 样品不同温度下的透过率曲线(样品+胶+宝石片)

之一。样品固定在 CF104 连续流低温恒温器的样品架上, 杜瓦瓶采用 ZnSe 窗口, 瓶内抽成真空。样品温度由 DTC-2 数字温度控制器控制并测定, 可在 80 K 到 300 K 之间改变。

测量到的 HgCdTe 样品-胶-宝石片的透过率曲线见图 1。图 2 是 ZnS-胶-ZnS 的透过率曲线, 其值用于计算 $e^{-\alpha_c d_c}$, 由于两个胶层厚度有微小差别, 会引进误差, 但很小。根据不同温度下的透过率曲线, 从式 (3) 可以算出不同温度下的吸收光谱, 见图 3 中的实验点。从每一温度下的吸收曲线可以确定禁带宽度, 方法如下: 把吸收边延长, 再把本征吸收带内比较平坦部分的吸收曲线反向延长, 其交点位置所对应的能量即为 E_g , 这样所得到的 E_g 值为实验值, 列在表 1 中。表 1 中的计算值是根据参考文献 [3] 中 E_g 的经验公式

$$E_g(\text{eV}) = (-0.295 + 1.87x - 0.28x^2) + (6.0 - 14x + 3.0x^2) \times 10^{-4}T, \quad (4)$$

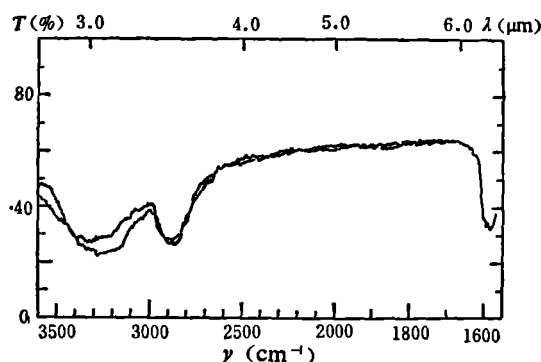


图 2 ZnS+胶+ZnS 的透过率($T=80 \text{ K}, 300 \text{ K}$)

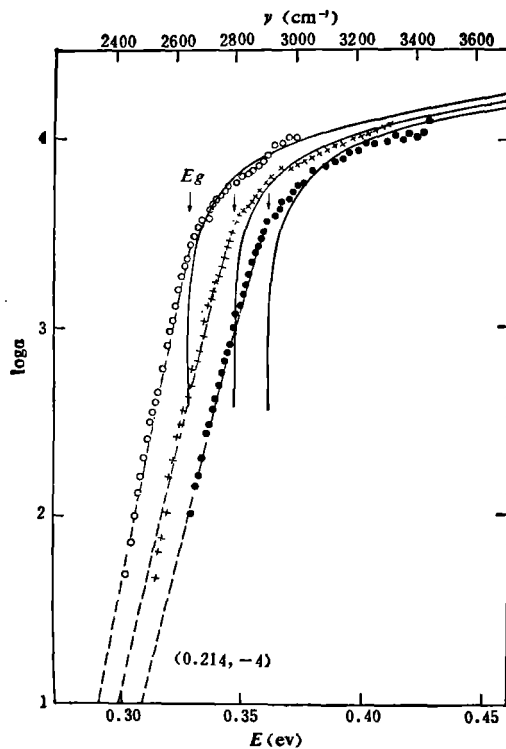


图3 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x=0.344$, $d=6.5\ \mu\text{m}$) 的本征吸收光谱(图中点是实验结果, 实线是根据 Kane 模型计算的, 虚线表示吸收边, 反向延长聚焦在 $(0.214, -4)$ 点)
 ○—80 K; +—200 K; ●—296 K

表1 E_g 的实验值和计算值

$T(\text{K})$	80	200	296
$E_g(\text{eV})$ 实验值	0.329	0.348	0.361
$E_g(\text{eV})$ 计算值	0.327	0.346	0.361

所计算得到的。把图3中不同温度的吸收边反向延长将聚焦于一点, 坐标为 $E_0=0.214\ \text{eV}$, $\alpha_0=10^{-4}\ \text{cm}^{-1}$, 根据参考文献[3]的计算规则, E_0 为

$$E_0(\text{eV}) = 1.30x - 0.23 = 0.217\ \text{eV}. \quad (5)$$

两者基本一致。在 $(E, \log \alpha)$ 坐标中, 斜率分别为 $66\ \text{eV}^{-1}$ ($T=80\ \text{K}$), $58\ \text{eV}^{-1}$ ($T=200\ \text{K}$), $53\ \text{eV}^{-1}$ ($T=296\ \text{K}$)。

三、理 论

价带电子在入射光的作用下垂直跃迁到导带。吸收系数为^[6]

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m^2 c n E} \sum_j M_j^2 \int \frac{2d^3 K}{(2\pi)^3} \delta[E_0(K) - E_j(K) - \hbar\omega]. \quad (6)$$

式中 n 为折射系数, E 为光子能量, M_j^2 是对所有方向平均的和对所有简并带求和的光学矩阵元的平方, 求和指标 j 指三个二重价带: 重空穴带, 轻空穴带和自旋轨道裂开带。式中积分项是联合态密度^[6-7], 对于非抛物带可以用下式进行计算:

$$\rho_j = \int \frac{2d^3 K}{(2\pi)^3} \delta[E_c(K) - E_j(K) - \hbar\omega] = \frac{K^2}{\pi^2} \left(\frac{dE_c}{dK} - \frac{dE_j}{dK} \right)^{-1}, \quad (7)$$

E_c , E_j 分别为导带和价带的能量, $j=1, 2, 3$ 分别指三个价带。根据 Kane 模型^[8], 在 $\Delta \gg |E_g|$, KP 的范围,

$$\begin{cases} E_c = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \left[E_g + \left(E_g^2 + \frac{8}{3} K^2 P^2 \right)^{1/2} \right], \\ E_{hh} = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m_{hh}}, \\ E_{lh} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \left[E_g - \left(E_g^2 + \frac{8}{3} K^2 P^2 \right)^{1/2} \right], \\ E_{s0} = -\Delta + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} - \frac{P^2 K^2}{3(E_g + \Delta)}. \end{cases} \quad (8)$$

式中各字母具有通常所有的意义。 $m_{hh} = 0.55m_0$ ^[9] 为重空穴有效质量。 P 为动量矩阵元, 在本项工作中其最佳符合值为 $P = 8 \times 10^{-8} \text{ eV-cm}$, 比理论计算值 $5.9 \times 10^{-8} \text{ eV-cm}$ ^[10] 及 $6.4 \times 10^{-8} \text{ eV-cm}$ ^[11] 要高, 与其它实验值 $8.5 \times 10^{-8} \text{ eV-cm}$ ^[12] 接近, 但略低一些。 E_g 为禁带宽度值。式(8)所表示的 $E-K$ 曲线见图 4。重空穴带能量与温度无关。轻空穴带和导带的能量通过 E_g 依赖于温度。式(7)所表示的联合态密度与波矢 K 的关系见图 5, ρ_1 是重空穴带与导带的联合态密度, ρ_2 是轻空穴带与导带的联合态密度, 它们对温度的依赖关系很小。从图中还可看出, 在波矢 K 从 0 到 $1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ 之内, 联合态密度从 0 急剧增加到 $10^{17} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$, 以后随着 K 大幅度增长, ρ 增加较为慢一些。因此当光子能量接近 E_g 时, 吸收将急剧增加, 而当光子能量大于 E_g 进入本征吸收带内后, 吸收曲线较为平坦一些。

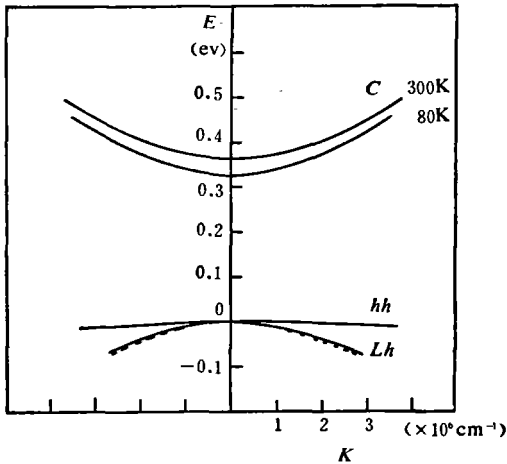


图 4 能量-波矢关系

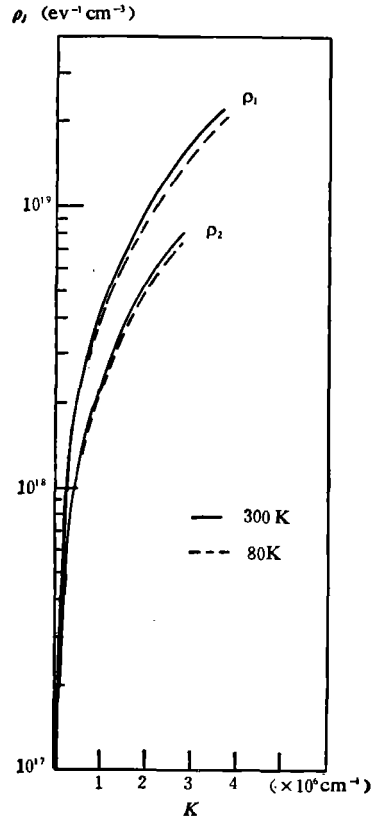


图 5 联合态密度-波矢关系

式(6)中光学矩阵元的平方可以写为^[8]

$$M_j^2 = \frac{2m_0^2 P^2}{3\hbar^2} [(a_c c_j + c_c a_j)^2 + (a_c b_j - b_c a_j)^2]. \quad (9)$$

a, b, c 是考虑微扰后波函数表达式中基矢的系数, 由下式计算:

$$\begin{cases} a_i = KP \left(E_i + \frac{2}{3} \Delta \right) / N, \\ b_i = \frac{\sqrt{2}}{3} \Delta (E_i - E_g) / N, \\ c_i = (E_i - E_g) \left(E_i + \frac{2}{3} \Delta \right) / N, \end{cases} \quad (10)$$

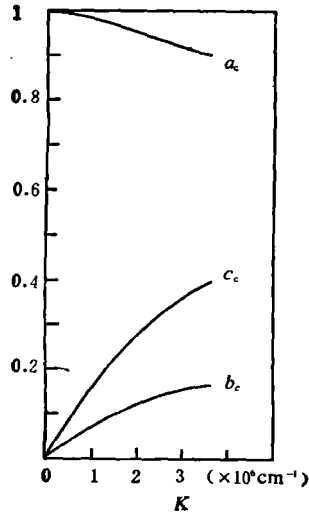


图6 导带的 a, b, c

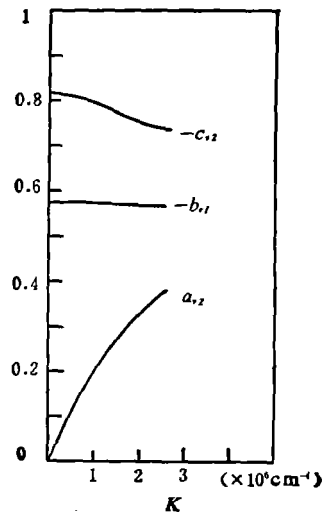


图7 轻空穴带的 a, b, c

此处 $i=1, 3$, 指导带和轻空穴带, 对于重空穴带, $a_2=0, b_2=1, c_2=0$ 。对于自旋轨道裂开带, $E_g + \Delta \gg$ 光子能量, 计算时不予考虑。 N 为归一化因子, 使

$$a_i^2 + b_i^2 + c_i^2 = 1.$$

由式(10)所得系数值在图6, 7中表示, 它们对温度的依赖关系都很小。若令

$$T_j^2 = (a_c c_j + c_c a_j)^2 + (a_c b_j - b_c a_j)^2, \quad (11)$$

则 T_j^2-K 曲线见图8, 当 $K=0$ 时, $T_j^2=1$, K 增加时, T_j^2 逐渐减小, 这也是造成本征吸收带趋于平坦的因素之一。

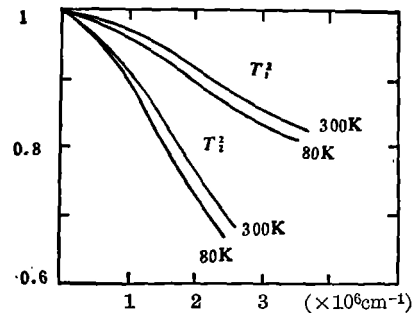


图8 系数因子 T_j^2 与波矢 K 的关系

对应于能量为 E 的入射光子, 根据能量守恒 $E = E_c - E_v$, 可以计算出跃迁所对应的波矢 K , 从而可从式(6)计算出 α 。取 $P = 8 \times 10^{-8} \text{ eV-cm}$, 计算得到的曲线即为图3中的实线, 与实验曲线符合较好。图9(a)分别画出了重空穴带和轻空穴带对吸收的贡献 α_{hh}, α_{lh} , 图9(b)表示 α_{lh}/α_{hh} 的值, 大约在0.27到0.40之间。

四、讨 论

从 Kane 理论计算的吸收曲线可以很好地解释实验吸收曲线转弯后的部分, 但不能解

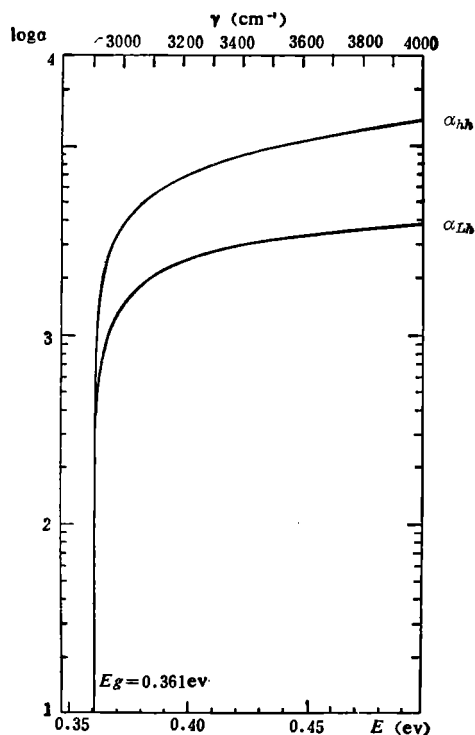


图 9(a) $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 重、轻空穴带对本征吸收的贡献 ($x=0.344, T=296\text{ K}, P=8 \times 10^{-8}\text{ eV-cm}, m_{hh}=0.55 m_0$)

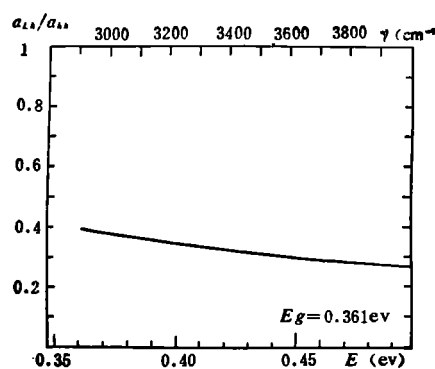


图 9(b) $\alpha_{Lh}/\alpha_{hh}-E$ 关系

释吸收边。如参考文献[2, 3]所指出, HgCdTe 的本征吸收边符合 Urbach 经验规则,

$$\alpha = \alpha_0 \exp[\sigma(E - E_0)/kT] \quad (12)$$

对 $x=0.344$ 的样品, 如本文第二节所述, $\alpha_0=10^{-4}\text{ cm}^{-1}$, $E_0=0.214\text{ eV}$, 根据图 3 中 ($E, \log \alpha$) 坐标中吸收边的斜率, 可以算得 σ/kT 为 152 eV^{-1} , 134 eV^{-1} , 122 eV^{-1} (分别对应于 80 K , 200 K , 300 K)。然而, 关于 HgCdTe 样品的 Urbach 吸收边的物理原因尚未见到讨论。

曾有不少作者假定在某些半导体导带底存在一个带尾。理由是当样品中杂质浓度较高时, 杂质波函数交迭形成杂质带, 如果杂质带展宽到与导带边交迭, 就形成一个带尾, 伸展到禁带之中。Kane 曾认为此带尾的态密度是高斯分布, 也有人认为是指数分布^[7], 形如

$$\rho \propto \exp[a(E - v)^n] \quad (13)$$

a 为常数, v 是平均势能, n 在 $\frac{1}{2}$ 到 2 之间。对 HgCdTe 材料, 导带底是否存在带尾? 为什么会形成带尾? 这是一个谜。但根据 HgCdTe 的指数吸收边, 我们可以初步推测在导带底存在一个态密度呈指数分布的带尾,

$$\rho \propto \exp[a(E - E_g)] \quad (13)$$

这一结果可以从指数吸收边反推出来。由于吸收系数正比于联合态密度, 假定吸收边仅涉及到很小的波矢 K 的范围内的光跃迁, 在此范围内光学跃迁矩阵元的平方可近似看作常数, 于是 Urbach 规则可以写为

$$\rho = \rho_0 \exp[\sigma(E - E_0)/kT], \quad (14)$$

当 $E = E_g$ 时, 有

$$\rho_g = \rho_0 \exp[\sigma(E_g - E_0)/kT],$$

从此式中解出 ρ_0 , 代入式(14), 有

$$\rho = \rho_g \exp[\sigma(E - E_g)/kT] \propto \exp[a(E - E_g)], \quad (15)$$

其中 ρ_g 是能量间隔为 $E = E_g$ 处的实际的联合态密度, $a = \sigma/KT$ 。

显然, 从 HgCdTe 的 Urbach 指数规则可以推测, 在导带底存在一个指数带尾, 但这个带尾的物理起因及其详细规律仍有待研究。

致谢——作者感谢导师汤定元教授和徐世秋老师的热情指导, 感谢季华美、林铁军、金茂林和余存浩所提供的帮助。

参 考 文 献

- [1] Scott M. W., *J. Appl. Phys.*, **40** (1969), 4077.
- [2] Finkman E., Nemirovsky Y., *J. Appl. Phys.* **50** (1979), 4356.
- [3] 褚君浩, 徐世秋, 汤定元, 科学通报, **27** (1982), 7: 403.
- [4] Baars J., Sorger F., *Solid State Commun.*, **10** (1972), 9: 875.
- [5] Packard R. D., *Applied Optics*, **8** (1969), 1901.
- [6] Bassani F., Pastori, Parravicini G., *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Oxford. New York. Toronto: PERGAMON PRESS, 1975, 154~155.
- [7] Moss T. S., Burrell G. J., Ellis B., *Semiconductor Opto-Electronics*, LONDON BUTTERWORTHS, 1973, p. 60, p. 88.
- [8] Kane E. O., *J. Phys. Chem. Solids*, **1** (1957), 249.
- [9] Bate R. T., Einspruch N. G., *Phys. Rev.*, **153** (1967), 796.
- [10] Katsuki S., Kunimune M., *J. Phys. Soc. Jap.*, **31** (1971), 415.
- [11] Overhof H., *Phys. Stat Sol. (b)* **45** (1971), 315.
- [12] Guldner Y., Rigaux C., Mycielski A., Couder Y., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **82** (1977), 149.
- [13] Johnson E. J., *Semiconductors and Semimetals*, Vol 3, 153~258.

THE INTRINSIC ABSORPTION SPECTRA OF $\text{Hg}_{0.656}\text{Cd}_{0.344}\text{Te}$ COMPARED WITH KANE MODEL

CHU JUNHAO

(Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The measurements of the intrinsic absorption spectra of $\text{Hg}_{0.656}\text{Cd}_{0.344}\text{Te}$ are performed with a PE580B infrared spectrophotometer at the temperature region from 80 K to 300 K. The thickness of the sample is $6.5\ \mu\text{m}$. The absorption coefficient as high as $10^4\ \text{cm}^{-1}$ has been measured. The values of energy gap and absorption edges at different temperatures are determined from absorption curves we measured. These values obey the empirical formula obtained in ref. 3. In this paper, the theoretical curves are also calculated by Kane's model. The best fit between theoretical and experimental curves happens, given momentum matrix element $P=8\times 10^{-8}\ \text{eV}\cdot\text{cm}$ and heavy-hole effective mass $m_{hh}=0.55m_0$. However, Kane's theory cannot describe the absorption edges. Based on Urbach's empirical exponential rule of absorption edge it might be deduced that at the bottom of the conduction band there is an exponential band tail which extends into the forbidden gap.