

简并 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体的费密能级 和 Burstein-Moss 效应

(详细摘要*)

褚 君 浩

(中国科学院上海技术物理研究所)

摘要——本文讨论了 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 窄禁带半导体在费密能级简并情况下, 本征载流子浓度计算公式的应用, 并计及导带电子浓度的非抛物带修正因子, 计算了简并 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体的费密能级。本文还在 77~300 K 温度范围内测量了组份为 $x=0.165$ 、 0.170 、 0.194 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄样品的本征吸收光谱, 观察到明显的 Burstein-Moss 移动。实验所得光学禁带宽度与费密能级计算结果一致。

一、引 言

当半导体的费密能级进入导带时, 本征光吸收边就会向短波方向移动, 这就是 Burstein-Moss 效应(BM 效应)^[1,2], 曾获得广泛研究。但对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体, 尚未见到有关报道。研究这一问题需要对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体的费密能级位置进行较准确的计算。

三元半导体 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 在 $x<0.3$ 的组份范围, 由于禁带宽度 E_g 窄, 带间相互作用强, 导致导带的强非抛物性, 费密能级很容易进入导带。确定强简并 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 费密能级位置的一般方法是采取自由电子费密气体近似^[3], 即认为导带电子分布在一个波矢为 K_f 的费密球内,

$$K_f = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad (1)$$

n 为导带电子浓度。再根据 Kane 模型^[4] 由下式计算费密面上的能量^[3,5]。

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3} + \frac{1}{2} \left[E_g + \sqrt{E_g^2 + \frac{8}{9} P^2 (3\pi^2 n)^{2/3}} \right], \quad (2)$$

对于一般简并情况下的费密能级位置, 可以根据导带电子浓度与费密能级的内在联系^[6], 较确切地对本征或非本征情况, 计算出 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体在不同温度下的费密能级位置。

本文 1984 年 4 月 11 日收到。

* 全文将发表于《红外研究》英文版(1985)。

我们进行小组份 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄样品的本征光吸收测量, 也发现其光学禁带宽度明显地大于其真正的禁带宽度。这种 Burstein-Moss 移动正需要用简并 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体费密能级位置的计算来定量地解释。

二、费密能级计算

1. 本征情况

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体的本征载流子浓度为^[6]

$$n_i = \frac{A \times 9.56 (10^{14}) E_g^{3/2} T^{3/2}}{1 + \sqrt{1 + 3.6 A E_g^{3/2} \exp(E_g/kT)}}, \quad (3)$$

及

$$n_i = A \times 1.29 (10^{14}) E_g^{3/2} T^{3/2} F_{1/2}(\eta), \quad (4)$$

其中 $\eta = (E_F - E_0)/kT$ 为简约费密能量, A 为非抛物带修正因子,

$$A = 1 + \frac{15}{4} \left(\frac{kT}{E_g} \right) \frac{F_{3/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} + \frac{105}{32} \left(\frac{kT}{E_g} \right)^2 \frac{F_{5/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)}. \quad (5)$$

$F_i(\eta)$ 为费密-狄拉克积分。在 $\eta < 1.3$ 时, $F_{1/2}(\eta)$ 可用下式近似^[7]:

$$F_{1/2}(\eta) = [0.27 + \exp(-\eta)]^{-1}. \quad (6)$$

式(5)中, $F_{3/2}(\eta)/F_{1/2}(\eta)$, $F_{5/2}(\eta)/F_{1/2}(\eta)$ 都是 η 的函数, 可根据费密-狄拉克积分表计算而得, 其值由图 1 中曲线表示。

由式(3)和式(4)得

$$F_{1/2}(\eta) \cdot [1 + \sqrt{1 + 3.6 A E_g^{3/2} \exp(E_g/kT)}] = 7.41, \quad (7)$$

这是一个关于 η 的超越方程。采用自洽计算方法可以计算出 η 以及 A , 再从式(3)或式(4)可算出 n_i 。在计算时采用下列禁带宽度经验公式^[8,9]:

$$E_g(\text{eV}) = -0.295 + 1.87x - 0.28x^2 + (6 - 14x + 3x^2)(10^{-4})T + 0.35x^4, \quad (8)$$

上式系根据 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄样品光吸收实验所得, 组份范围为 $x = 0.19 \sim 0.37$, 温度范围为 $T = 77 \sim 300 \text{ K}$ 。但如参考文献[9]所证明, 该式也能适用于 $x = 0 \sim 0.30$ 和 $T = 4 \sim 77 \text{ K}$ 范围。这里我们假定该式在 $x = 0.165 \sim 0.19$ 和 $T = 77 \sim 300 \text{ K}$ 范围也是适用的。对于我们实验用的 $x = 0.165$ 、 $x = 0.170$ 以及 $x = 0.194$ 样品, 可算得本征情况下的简约费密能量 η 、非抛物带修正因子 A , 以及本征载流子浓度 n_i 和禁带宽度 E_g 值。在图 2、3、4 中用虚线表示本征情况下的 η - T 曲线。

2. 非本征情况

由于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的浅施主杂质能级几乎与导带相连, 不能束缚电子, 处于全电离状态。因此, 根据样品在 77 K 下测量霍耳系数得到的有效施主浓度 N_D^* , 利用 $n_i^2 = n(n - N_D^*)$, 可以容易地算得在任一温度下的载流子浓度。再根据

$$n = A \times 1.29 (10^{14}) (E_g T)^{3/2} F_{1/2}(\eta), \quad (9)$$

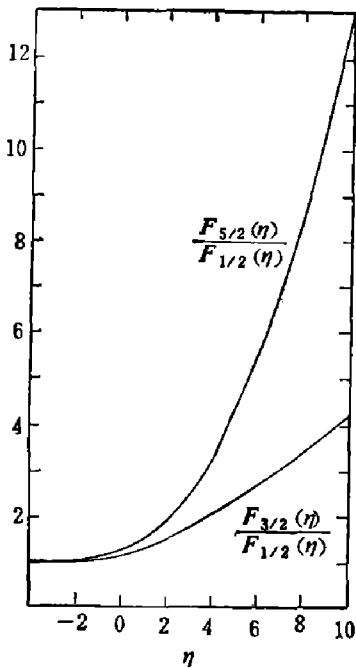


图 1 $F_{3/2}(\eta)/F_{1/2}(\eta)$, $F_{5/2}(\eta)/F_{1/2}(\eta)$ 对 η 的关系

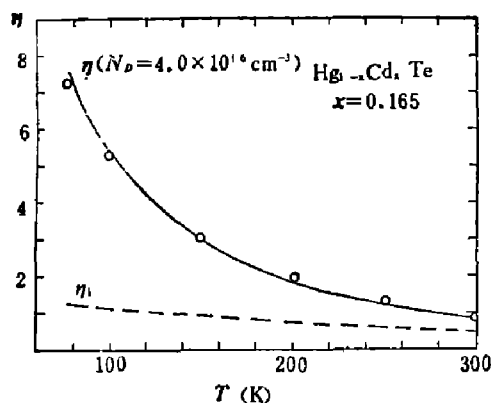


图2 $x=0.165$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品 ($N_D^*=4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) 的简约费密能级

图中实验点是本文光吸收实验结果。虚线是本征简约费密能级。

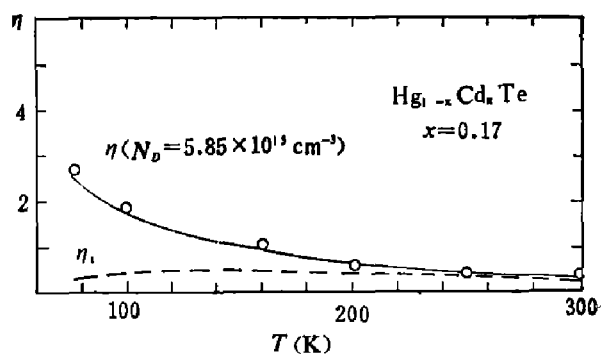


图3 $x=0.170$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品 ($N_D^*=5.85 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) 的简约费密能级

实验点是本文光吸收实验所得。虚线是本征简约费密能级。

以及^[7]

$$F_{1/2}(\eta) = \begin{cases} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\eta^2 + 1.7)^{3/4} & (\eta > 1.3) \\ [0.27 + \exp(-\eta)]^{-1} & (\eta \leq 1.3) \end{cases} \quad (10)$$

计算 η 。对于 $x=0.165$ ($N_D^*=4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), $x=0.170$ ($N_D^*=5.85 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), $x=0.194$ ($N_D^*=2.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) 的三个样品, 可算得非本征情况下的 η 和 A 。在图 2、3、4 中画出了三个组份的样品在本征和非本征情况下, 简约费密能量随温度的变化关系。由图可见, 对于简并 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体, 在 77 K 到 300 K 温度范围, 实际费密能级相对于导带底的位置随温度升高而降低, 并随着温度接近室温而逐渐向本征费密能级趋近。从图中也可看出, 有效施主浓度越大, 简约费密能量也越高, 这在低温下尤为显著。为了更清楚地看出费密能级随有效施主浓度的变化, 我们以 $x=0.194$ 为例, 假定 $N_D^*=1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $2.26 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, 计算了简约费密能量, 并把结果画在图 4 中。可见, 对 $N_D^*=1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 的样品, 当温度低于 150 K 就发生简并, 而对 $N_D^*=2.26 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 的样品, 直到 $T=77 \text{ K}$ 时, 才刚刚简并。

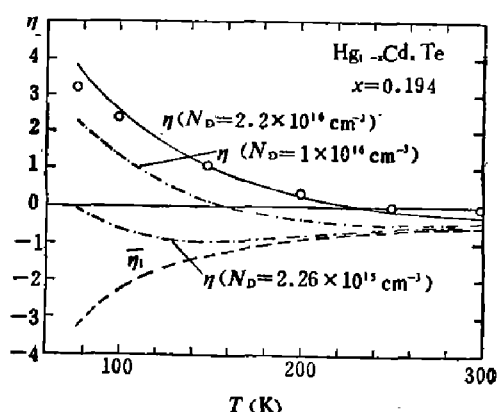


图4 $x=0.194$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品 ($N_D^*=2.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) 的简约费密能级

实验点根据本文光吸收实验所得。虚线是本征情况下的简约费密能级。点划线分别是假定 $N_D^*=1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $2.26 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 时的简约费密能级。

三、Burstein-Moss 效应

在小组份 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品的本征光吸收的实验中期待会观察到 BM 移动。实验采用半熔法和碲溶剂生长的 $x=0.165$ 、 0.170 和 0.194 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品, 有效施主浓度分别是 $N_D^*=4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 、 $5.85 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 和 $2.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 。样品分别粘在 Si, KRS-5 和 ZnSe 透明衬底上, 并把样品分别减薄到 $10 \mu\text{m}$ 、 $9 \mu\text{m}$ 和 $24 \mu\text{m}$, 样品厚度用干涉显微镜和

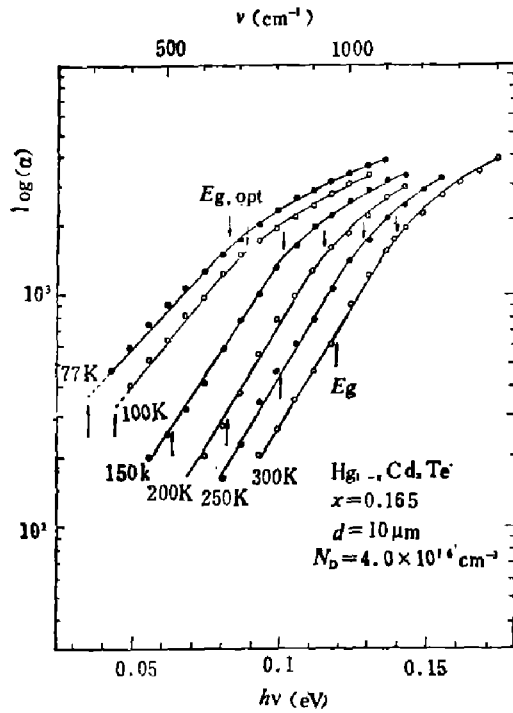


图5 $x=0.165$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品 ($d=10\mu\text{m}$, $N_D^*=4\times 10^{16}\text{cm}^{-3}$) 的本征吸收光谱

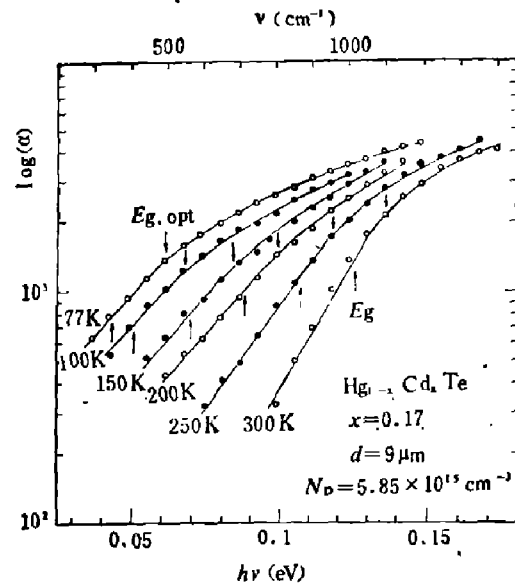


图6 $x=0.170$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品 ($d=9\mu\text{m}$, $N_D^*=5.85\times 10^{15}\text{cm}^{-3}$) 的本征吸收光谱

螺旋测微仪测定。实验采用 PE983 型红外分光光度计, 在 $2000\sim 300\text{cm}^{-1}$ 波数范围和 $77\sim 300\text{K}$ 温度范围测量透过率, 按照公式:

$$T = \frac{(1-R)^3 e^{-\alpha l}}{1 - R^2 e^{-2\alpha l}}, \quad (11)$$

并采用参考文献[10]的方法扣除衬底修正, 计算吸收系数。图5、6、7分别画出了 $x=0.165$ 、 0.170 和 0.194 三个样品在不同温度下的吸收光谱。从图中可以看到, 在 $\alpha=1200\sim 1700\text{cm}^{-1}$ 左右, 每条吸收曲线都呈现出斜率变小的转折区域。图中用由上向下的箭头标出了这一位置, 这一位置表示了简并情况下的光学禁带宽度 $E_{g,opt}$, 其能量为^[11]

$$E_{g,opt} = E_g + \left(1 + \frac{m_o}{m_h}\right) E_f \doteq E_g + E_f. \quad (12)$$

在图5~7中, 用由下向上的箭头表示不同温度下根据式(8)计算而得的禁带宽度 E_g 位置。由

$$\eta = \frac{E_{g,opt} - E_g}{kT}, \quad (13)$$

图7 $x=0.194$ 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品 ($d=24\mu\text{m}$, $N_D^*=2.2\times 10^{16}\text{cm}^{-3}$) 的本征吸收光谱

就可得到实际测量到的简约费密能量。不同温度下不同组份样品的光学禁带宽度和简约费密能级的测量值, 列在表1中, 并在图2、3、4中分别用符号标出。实验结果与本文费密能级计算结果基本相符。

表 1 实验测得的光学禁带宽度和简约费密能级

| x | $T(K)$ | $E_g(eV)$ | $E_{g,opt}(eV)$ | $\eta_{实验}$ | $\eta_{计算}^{1)}$ |
|--|--------|-----------|-----------------|-------------|------------------|
| 0.165 ($N_D^* = 4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) | 77 | 0.0349 | 0.083 | 7.23 | 7.6 |
| | 100 | 0.0436 | 0.0893 | 5.29 | 5.4 |
| | 150 | 0.0624 | 0.1016 | 3.04 | 2.97 |
| | 200 | 0.0813 | 0.1153 | 1.97 | 1.84 |
| | 250 | 0.100 | 0.1277 | 1.29 | 1.24 |
| | 300 | 0.119 | 0.140 | 0.81 | 0.87 |
| 0.170 ($N_D^* = 5.85 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) | 77 | 0.044 | 0.062 | 2.71 | 2.5 |
| | 100 | 0.052 | 0.0682 | 1.88 | 1.67 |
| | 150 | 0.0705 | 0.0843 | 1.06 | 0.90 |
| | 200 | 0.089 | 0.0992 | 0.59 | 0.62 |
| | 250 | 0.1075 | 0.1178 | 0.48 | 0.45 |
| | 300 | 0.126 | 0.1364 | 0.40 | 0.33 |
| 0.194 ($N_D^* = 2.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) | 77 | 0.084 | 0.1054 | 3.22 | 3.88 |
| | 100 | 0.091 | 0.1116 | 2.39 | 2.63 |
| | 150 | 0.108 | 0.1227 | 1.06 | 1.05 |
| | 200 | 0.1245 | 0.1302 | 0.33 | 0.25 |
| | 250 | 0.142 | 0.1426 | 0.027 | -0.09 |
| | 300 | 0.160 | 0.1612 | 0.046 | -0.22 |

1) $\eta_{计算}$ 取自图 2, 3, 4 中实线。

四、讨 论

1. 对于 $x=0.165 \sim 0.194$ 的简并 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 半导体, 从薄样品光吸收实验所得光学禁带宽度值与费密能级计算结果是一致的。在计算过程中采用了参考文献[8][9]所得的禁带宽度经验公式, 即式(8)。实验与计算结果的一致, 说明公式(8)也可适用于 $x=0.165 \sim 0.194$, $T=77 \sim 300 \text{ K}$ 范围。综合[8][9]和本文结果, 禁带宽度公式(8)可以适用于 $x=0 \sim 0.165$, $T=4.2 \sim 77 \text{ K}$ 以及 $x=0.165 \sim 0.37$, $T=4.2 \sim 300 \text{ K}$ 范围。也包括 $x=1$, CdTe 的范围。

2. 根据 BM 修正因子可以对吸收系数的理论计算值进行修正。当电子吸收光子能量, 从价带跃迁到导带时, 吸收系数为^[5, 12]

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m^2 c n E} \sum_j M_j^2 \left\{ \frac{2d^3 K}{(2\pi)^3} \delta[E_o(K) - E_i(K) - \hbar\omega], \right. \quad (14)$$

用 Kane 的能带表示式代入, 可以计算理论吸收系数。如果考虑 BM 效应, 则可对式(14)中 j 指标分别指重空穴带及轻空穴带, 算出 α_{hh} 和 α_{lh} , 再按^[11]

$$\alpha = \frac{\alpha_{hh}}{1 + e^{\eta - \epsilon_{hh}}} + \frac{\alpha_{lh}}{1 + e^{\eta - \epsilon_{lh}}}, \quad (15)$$

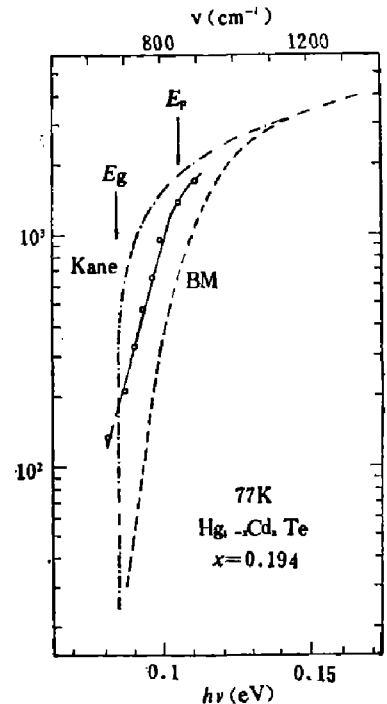


图 8 吸收曲线的 BM 修正

○ 实验点 ——— Kane 模型
计算 ——— Kane 模型并考虑
BM 修正计算

计算吸收系数。其中 $\epsilon_{hh}(\epsilon_{lh})$ 为电子从重空穴带(轻空穴带)跃迁到导带处的简约能量。对 $x=0.194$, $T=77\text{ K}$, 用式(14)计算, 结果在图 8 中用点划线表示; 利用式(15)计算所得吸收系数在图 8 中用虚线表示; 计算参数为 $E_g=0.084\text{ eV}$, $P=8\times 10^{-8}\text{ eV}\cdot\text{cm}$, $m_{hh}=0.55m_0$, $\Delta=1\text{ eV}^{[10]}$; 实验结果由点表示。实验结果与 Kane 理论计算有偏差, 说明在简并情况下, 有必要在计算吸收系数时进行 BM 修正。但修正后的理论计算结果明显低于实验结果, 这可能是由于与导带简并的杂质态接受从价带跃迁来的电子, 从而对态密度函数有所贡献。这方面仍须进行深入的实验和理论研究。

3. 可以通过不同温度下吸收边的测定, 分析样品的质量。

致谢——作者感谢导师汤定元教授和徐世秋老师给予的指导, 以及沈杰、李捍东、季华美、肖继荣、唐荷珍等同志提供的帮助。

参 考 文 献

- [1] Burstein E., *Phys. Rev.*, **93** (1954), 632.
- [2] Moss T. S., *Proc. Phys. Soc.*, **B67** (1954), 775.
- [3] Dornhaus R. and Nimtz G., in *Narrow Gap Semiconductors* (Springer Tracts in Modern Physics Vol. 98) Springer-Verlag, 1983, 119.
- [4] Kane E. O., *J. Phys. Chem. Solids*, **1** (1957), 249.
- [5] Zawadzki W. and Szymanska W., *J. Phys Chem. Solids*, **32** (1971), 1151.
- [6] 褚君浩, 王戎兴, 汤定元, 红外研究, **2** (1983), 241.
- [7] 勃莱克莫尔, 半导体统计学, 上海科学技术出版社, 1965, 309、314.
- [8] 褚君浩, 徐世秋, 汤定元, 科学通报, **27** (1982), 403.
- [9] Chu Junhao, Xu Shichou and Tang Dingyuan, *Appl. Phys. Lett.*, **43** (1983), 1064.
- [10] 褚君浩, 红外研究, **2** (1983), 89. AD-A135504/9.
- [11] Moss T. S., Burrell G. J., Ellis B., *Semiconductor Opto-Electronics*, Butterworth, 1973, 84~85.
- [12] Bassani F., Pastori Parravicini G. *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Oxford, New York, Toronto: Pergamon Press, 1975, 154~155.

FERMI LEVEL AND BURSTEIN-MOSS EFFECT OF DEGENERATE SEMICONDUCTOR $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

CHU JUNHAO

(Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The application of the intrinsic carrier concentration formula in degeneration of the Fermi level with conduction band for narrow gap semiconductor $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ is discussed. The Fermi level in degenerate semiconductor $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ is calculated by taking account of the non-parabolic band revision factor for the electron concentration in conduction band.

The intrinsic absorption spectra for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ thin samples with $x=0.165$ ($10\ \mu\text{m}$), $x=0.170$ ($9\ \mu\text{m}$) and $x=0.194$ ($24\ \mu\text{m}$) are measured in the temperature region $77\sim 300\ \text{K}$. Burstein-Moss shift is observed obviously. The optical energy gap obtained from the experiment agrees well with the calculated result of the Fermi level.