

Hg_{1-x}Cd_xTe 半导体的导带电子有效质量

褚 君 浩

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理开放研究实验室)

摘要——根据 Hg_{1-x}Cd_xTe 本征吸收光谱拟合计算获得的能带参数, 利用 Kane 模型得到导带底电子有效质量的计算公式: $(m_0^*/m_0) = 0.05966 E_g (E_g + 1) / (E_g + 0.667)$ 。再根据 $(m^*/m_0) = (m_0^*/m_0) \sqrt{1 + 8P^2 k^2 / 3E_g^2}$, 可以计算波矢为 k 处的导带电子有效质量, 计算结果与实验结果符合较好。

一、能带参数

Hg_{1-x}Cd_xTe 窄禁带半导体的导带电子有效质量是一个重要的物理量, 它依赖于非抛物带的形状, 取决于禁带宽度、动量矩阵元、自旋轨道裂距等能带参数。我们曾对一系列不同

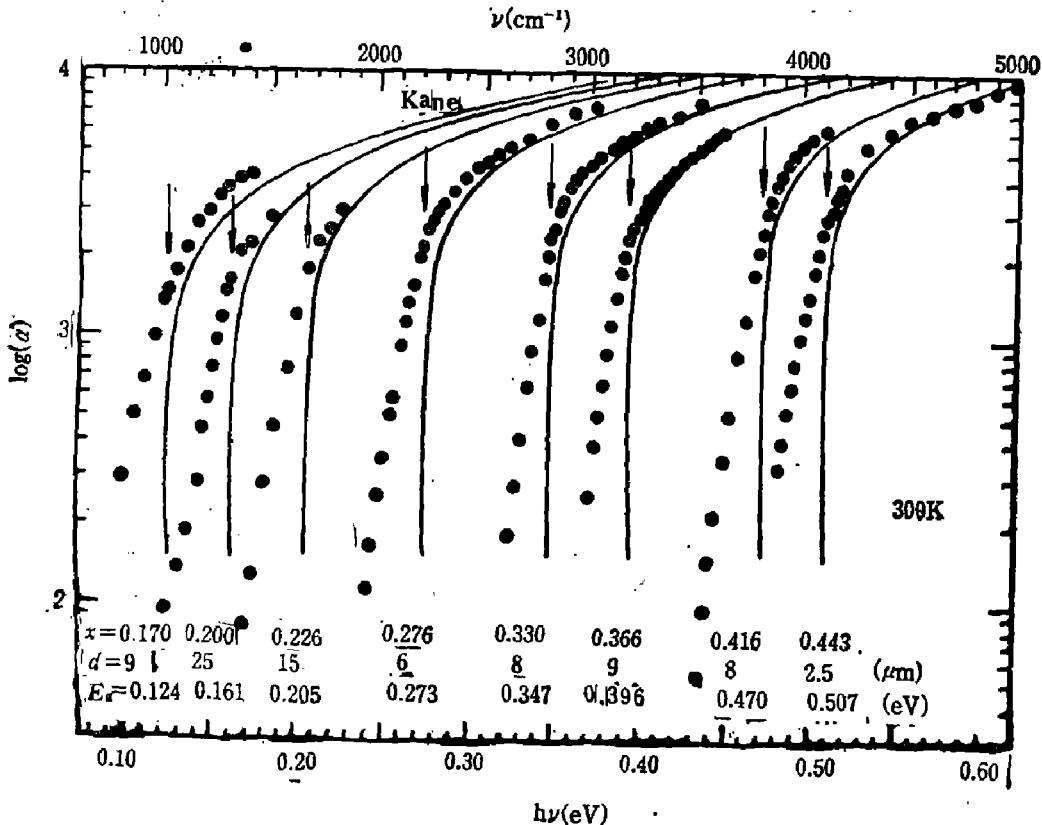


图 1 $x=0.170\sim 0.443$ 的 Hg_{1-x}Cd_xTe 薄样品本征吸收光谱

Fig. 1 Intrinsic absorption spectra for Hg_{1-x}Cd_xTe thin samples with $x=0.170\sim 0.443$ at room temperature

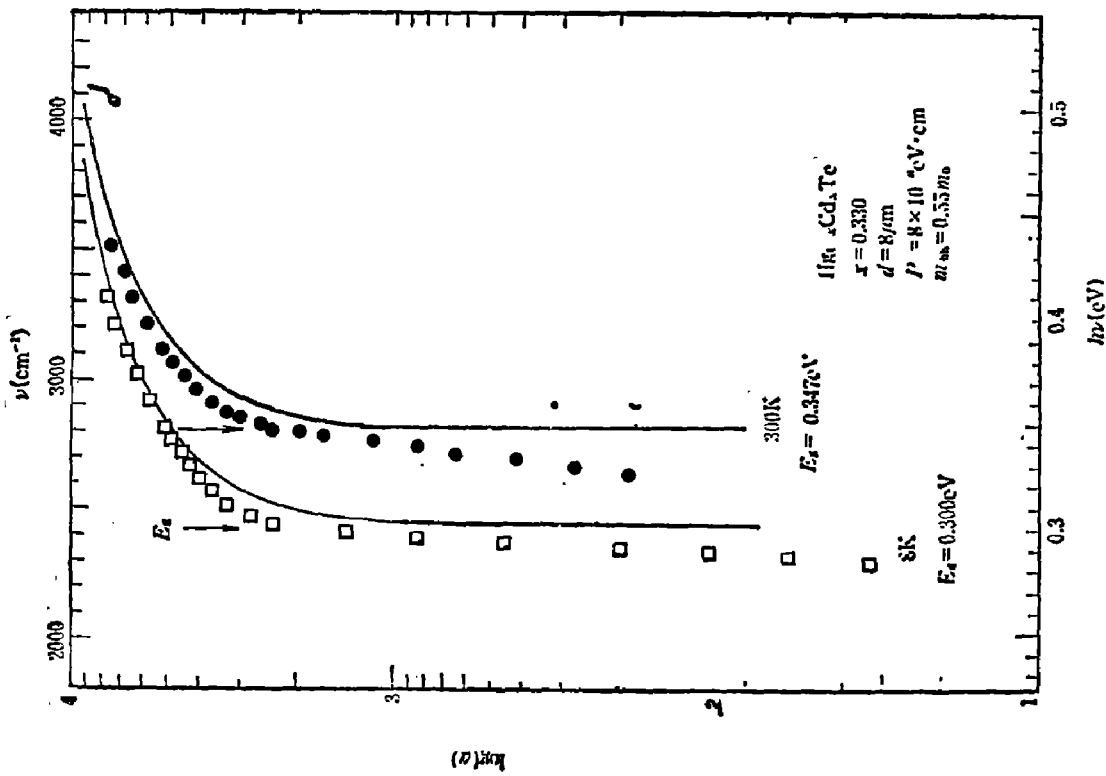


图 2 $x=0.330$ ($d=8\mu\text{m}$) 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄样品本征吸收光谱
 Fig. 2 Experimental and calculated absorption spectra for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ sample with $x=0.330$, $d=8\mu\text{m}$ at 8K and 300K, respectively

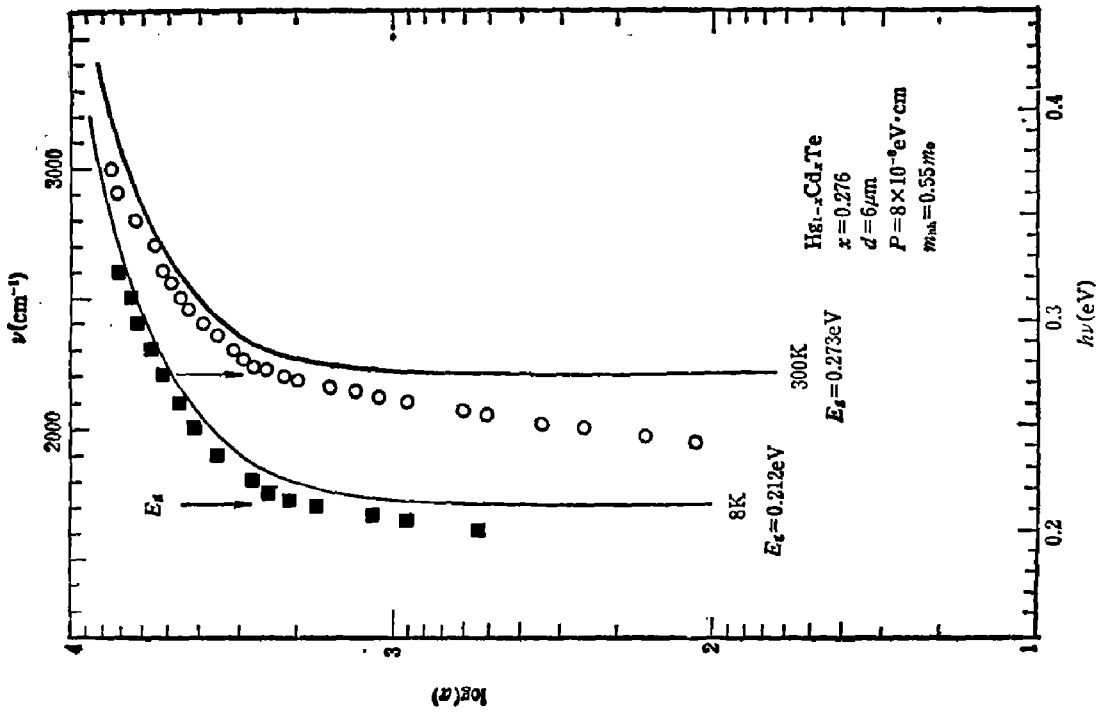


图 3 $x=0.276$ ($d=6\mu\text{m}$) 的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄样品本征吸收光谱
 Fig. 3 Experimental and calculated absorption spectra for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ sample with $x=0.276$, $d=6\mu\text{m}$ at 8K and 300K, respectively

组份的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄样品进行了本征吸收光谱测量^[1,2], 由于样品很薄, 因而获得了比较完全的吸收光谱, 具有陡峭的吸收边和平坦的本征吸收带, 为吸收光谱的拟合计算提供了实验依据, 并通过拟合计算获得了有关能带参数。

实验所用样品已在参考文献[1、2]中叙述, 样品放在低温杜瓦瓶内, 可在液氮温度到室温范围内进行测量, 由 PE983 红外分光光度计测得的透射光谱计算吸收光谱, 计算时要考虑到衬底的修正^[1,2]。计算结果见图 1~3。图中方点和圆点表示由实验测量结果得到的吸收光谱, 实线是理论计算的吸收曲线。

理论吸收曲线是根据电子从价带到导带的光跃迁理论, 并采用窄禁带半导体的 Kane 能带模型计算的^[3,4]:

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m_0^2 n c E} \sum_j |M_j|^2 \int \frac{2d^3 k}{(2\pi)^3} \delta(E_c - E_j - \hbar\omega), \quad (1)$$

式中 $|M_j|^2$ 是光学矩阵元的平方, 求和指标指重空穴带和轻空穴带, 积分项为联合态密度。算得的 α 包括了重空穴带到导带跃迁的贡献以及轻空穴带到导带跃迁的贡献。计算中所用禁带宽度值由实验测得的吸收光谱而定, 即取吸收边終了、吸收曲线开始转弯的区域(即吸收边延长线与吸收曲线偏离吸收边的交点)的光子能量为 E_g , 具体取值已在图中分别标明。在本文所涉及的组份范围和温度范围($x=0.170\sim 0.443$, $T=8\sim 300\text{K}$), 计算中一律取动量矩阵元 $P=8\times 10^{-8}\text{eV}\cdot\text{cm}$, 重空穴有效质量 $m_{hh}=0.55m_0$, 自旋轨道裂距 $\Delta=1\text{eV}$ 。计算所得结果与实验结果有最佳符合。在图 1~3 中, 实线即为取上述能带参数理论计算所得吸收光谱, 理论吸收曲线的低能部分与实验测得的吸收边存在着偏离, 这是由于电子-声子相互作用以及带尾态等原因引起的, 是另一个有趣的课题。

二、导带电子有效质量

在自旋轨道裂距 $\Delta \gg E_g$ 、 kP 条件(以下计算恒满足该条件)下, Kane 的导带能量表达式为^[3]

$$E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \left[E_g + \sqrt{E_g^2 + \frac{8}{3} k^2 P^2} \right]. \quad (2)$$

采用回旋共振有效质量定义

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{1}{k} \frac{\partial E}{\partial k} \right), \quad (3)$$

有

$$\frac{m^*}{m_0} = \left[1 + \frac{4m_0 P^2}{3\hbar^2} \left(E_g^2 + \frac{8}{3} k^2 P^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \right]^{-1}. \quad (4)$$

由于窄禁带半导体 $m^*/m_0 \ll 1$, 因此括号中的 1 可以忽略。这样简化以后, 对于 $m^*/m_0 \approx 0.01$ 的情况, 引进的误差小于 1%, 从而有

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{m_0^*}{m_0} \sqrt{1 + \frac{8}{3} \frac{k^2 P^2}{E_g^2}}, \quad (5)$$

式中 m_0^* 为导带底电子有效质量, m^* 是波矢为 k 处的导带电子有效质量。在以下计算中, k 由导带电子浓度 n 给出, 由此得到 $m^*(n)$ 。式(5)也可写成

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{m_0^*}{m_0} \left(1 + \frac{2E_k}{E_g} \right), \quad (6)$$

式中 E_k 是波矢为 k 处的导带电子能量。根据式(4), $k=0$ 处的

$$\frac{m_0^*}{m_0} \doteq \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 E_g}{P^2 m_0}, \quad (7)$$

这是较为粗略的近似表达式。为了得到比式(7)更精确的导带底电子有效质量表达式, 可以采用小 k 近似下 Kane 的导带能量表达式^[3]:

$$E_c = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{P^2 k^2}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right). \quad (8)$$

根据有效质量定义, 得到

$$m_0^* = \frac{\hbar^2 E_g (E_g + \Delta)}{2P^2 (E_g + 2\Delta/3)}. \quad (9)$$

把吸收光谱拟合计算所得到的 P 和 Δ 的值代入, 有

$$\frac{m_0^*}{m_0} = 0.05966 \frac{E_g (E_g + 1)}{E_g + 0.667}, \quad (10)$$

其中^[5]

$$E_g (\text{eV}) = -0.295 + 1.87x - 0.28x^2 + (6 - 14x + 3x^2)(10^{-4})T + 0.35x^4. \quad (11)$$

根据式(10)和式(11)可以计算不同温度下不同组份样品的 (m_0^*/m_0) 值, 再利用式(5)或式(6), 即可计算波矢 k 处或能量 E_k 处的导带电子有效质量。

三、与实验结果比较

图 4 给出了 4.2K 温度下导带底电子有效质量与组份 x 的关系。图中曲线根据式(10)和式(11)计算, 方点取自参考文献[6], 圆点取自参考文献[7], 请参看文献[8~19]。

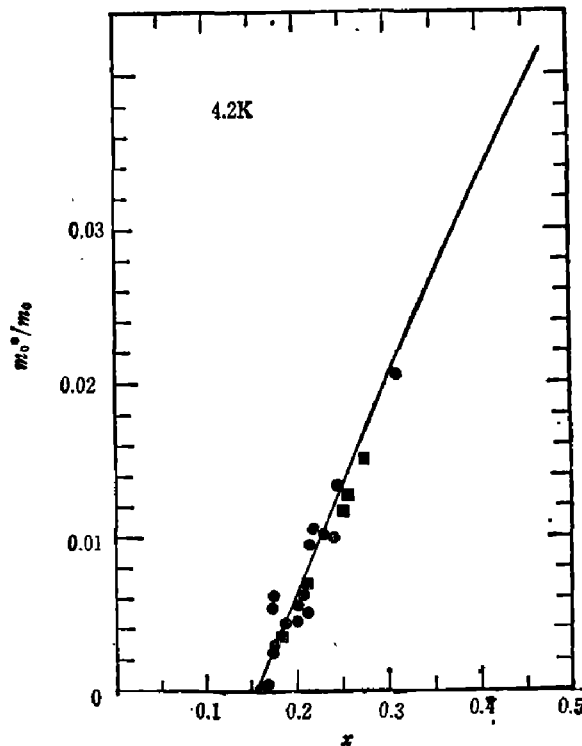


图 4 4.2K 时导带底电子有效质量与组份的关系

Fig. 4 Effective mass of electrons at the bottom of conduction band vs x at 4.2K

表 1~3 比较了简并情况下导带电子有效质量的实验结果和计算结果。Antcliffe^[8]对同一组份、不同电子浓度的样品在 4.2 K 温度下测量 SdH 效应, 获得电子浓度 n 以及波矢为 $k = (3\pi^2 n)^{1/3}$ 处的导带电子有效质量 $m^*(n)$ 。实验所用样品在 77 K 下的光电导响应截止波长为 $\lambda_{c0} = 13.7 \mu\text{m}$, 对应能量 $E_{c0} = 0.0903 \text{ eV}$ 。采用 Schmit 等^[20]所得的截止能量 E_{c0} 与组份 x 的关系, 可以算得该样品组份为 $x = 0.1975$, 实验测得该样品 4.2 K 下的禁带宽度为 0.0635 eV , 与公式(11)计算结果 $E_g = 0.064$ 符合。利用式(10), 算得导带底电子有效质量为 $(m_0^*/m_0) = 0.00555$, 实验所得值为 $(m_0^*/m_0)_{\text{exp}} = 0.0056 \pm 0.00025$, 计算结果与实验结果符合很好。在波矢 $k = (3\pi^2 n)^{1/3}$ 处的导带电子有效质量的测量值 $(m^*(n)/m_0)_{\text{exp}}$ 和计算值 $(m^*(n)/m_0)_{\text{cal}}$ 列于表 1, 计算结果与实验结果符合较好。

表 1 不同电子浓度的 $x = 0.1975$ 样品在 4.2 K 时的导带电子有效质量 ($E_g = 0.0635 \text{ eV}$, $m_0^*/m_0 = 0.00555$)

Table 1 The effective mass of electron at wave vector $k = (3\pi^2 n)^{1/3}$ for $x = 0.1975$, $T = 4.2 \text{ K}$ ($E_g = 0.0635 \text{ eV}$, $m_0^*/m_0 = 0.0055$)

$n(\text{cm}^{-3})$	$(m^*/m_0)_{\text{cal}}$	$(m^*/m_0)_{\text{exp}}$
2.32×10^{15}	0.00726	0.00702
3.10×10^{15}	0.00756	0.00755
5.90×10^{15}	0.00847	0.00830
6.60×10^{15}	0.00867	0.00910
8.00×10^{15}	0.00898	0.00920
9.66×10^{15}	0.00938	0.00966

表 2 不同温度下 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品的导带电子有效质量的实验值和计算值

Table 2 Experimental and calculated values of the effective mass of electron at wave vector $k = (3\pi^2 n)^{1/3}$ for several samples at 77K, 1.3K, etc.

$T(\text{K})$	x	$E_g(\text{eV})$	$n(\text{cm}^{-3})$	m_0^*/m_0	$(m^*/m_0)_{\text{cal}}$	$(m^*/m_0)_{\text{exp}}$
77	0.135	-0.0154	1.7×10^{16}	0.00136	0.0093	0.010 ± 0.0015
	0.144	-0.0002	8.0×10^{15}	0.0000178	0.0071	0.0068 ± 0.0005
	0.149	0.0083	6.7×10^{15}	0.000739	0.0068	0.0069 ± 0.0004
	0.150	0.0099	2.3×10^{16}	0.000882	0.0102	0.010 ± 0.002
	0.188	0.074	1.4×10^{15}	0.00637	0.0075	0.0076 ± 0.0005
	0.193	0.082	3.5×10^{15}	0.00706	0.0088	0.0085 ± 0.0015
	0.203	0.099	8.9×10^{14}	0.00847	0.0091	0.010 ± 0.003
1.3	0.144	-0.0315	2×10^{15}	0.00277	0.0052	0.0055 ± 0.0015
	0.149	-0.0221	2×10^{15}	0.00195	0.00489	0.0048 ± 0.0007
87	0.149	0.0121	8.3×10^{15}	0.0011	0.00742	0.0073 ± 0.0006
100	0.149	0.0174	1.0×10^{16}	0.0015	0.00755	0.0070 ± 0.0008
125	0.149	0.0273	1.5×10^{16}	0.00241	0.00900	0.0082 ± 0.0010

Wiley 等^[21]利用螺旋波在晶体中的传播在 77 K 和 1.3 K 测定了不同组份、不同电子浓度在波矢 $k = (3\pi^2 n)^{1/3}$ 处的导带电子有效质量, 还对 $x = 0.149$ 样品在不同温度下进行了测量, 测量结果与本文式(5)、(10)、(11)计算结果的比较列于表 2。从表中可见, 计算结果都在实验误差范围之内。

表3 高电子浓度样品的导带电子有效质量

Table 3 The effective mass of electron for high concentration samples

T(K)	x	E_g (eV)	n (cm^{-3})	(m^*/m_0)	$(m^*/m_0)_{\text{cal}}$	$(m^*/m_0)_{\text{exp}}$
4	0	-0.3	4.7×10^{17}	0.024	0.035	0.035
	0	-0.3	1.18×10^{18}	0.024	0.0417	0.043
	0	-0.3	2.82×10^{18}	0.024	0.0516	0.052
	0.15	-0.0192	4.0×10^{17}	0.0017	0.026	0.024
	0.15	-0.0192	1.6×10^{18}	0.0017	0.0418	0.038
	0.15	-0.0192	2.4×10^{18}	0.0017	0.0479	0.047
300	0	-0.115	5.1×10^{17}	0.00978	0.0292	0.029
	0	-0.115	1.2×10^{18}	0.00978	0.0380	0.041
	0	-0.115	5.8×10^{18}	0.00978	0.0625	0.062
	0.1	0.0281	6.2×10^{16}	0.00247	0.0142	0.010
	0.1	0.0281	2.7×10^{17}	0.00247	0.023	0.022
	0.1	0.0281	8.5×10^{17}	0.00247	0.0337	0.033
	0.1	0.0281	2.7×10^{18}	0.00247	0.0495	0.047
	0.19	0.154	1.1×10^{18}	0.0129	0.037	0.034
	0.20	0.168	3.35×10^{18}	0.0140	0.052	0.047
	0.29	0.292	4.8×10^{17}	0.0235	0.0346	0.036
	0.31	0.319	1.0×10^{18}	0.0254	0.040	0.037

Sosnowski 等^[22] 对高电子浓度样品进行了测量, 他们通过测量温差电动势率与横向磁场的关系, 求出了费密能级处的电子有效质量, 表3列出了测量结果与计算结果。实验误差约在 $\pm 10\%$ 以内, 理论计算结果(除一个样品之外)都在实验误差之内。

致谢——作者感谢导师汤定元教授的指导和提供的资料, 并感谢林和同志的建议。

参 考 文 献

- [1] 褚君浩, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 三元半导体能带参数和晶格振动的光谱研究, 博士论文, 中国科学院上海技术物理研究所 (1984).
- [2] 褚君浩等, 红外研究, **4A** (1985), 4: 255.
- [3] Kane E. O., *J. Phys. Chem. Solids*, **1** (1957), 249.
- [4] Bassani F. and Parravicini G. P., *Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Oxford, Pergamon Press, 1975, 154~155.
- [5] Chu Junhao, Xu Shichou and Tang Dingyuan, *Appl. Phys. Lett.*, **43** (1983), 1064.
- [6] Guldner Y., *Science Doctor Thesis*, Universite Pierre et Marie Curie (Paris VI), Paris, 1979.
- [7] Dornhaus R. and Nimtz G., The Properties and Applications of the $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Alloy System, in *Narrow Gap Semiconductors*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol 98, 1983, p 119.
- [8] Antcliffe G. A., *Phys. Rev.*, **B2** (1970), 345.
- [9] Ellis B. and Moss T. S., *In Proc. III Int. Conf. on Photoconductivity*, Calif. 1969, ed. by E. M. Pell, Pergamon, N. Y., 1971, p 211.
- [10] Suizu K. and Narita S., *Rep of the Depart. of Mat. Phys. in the Faculty of Eng. Science of Osaka University*

Toyonaka, Osaka, Japan, 1973.

- [11] Strauss A. J., Harman T. C., Mavroides J. G., Dickey D. H. and Dressehaus M. S., *Proc. 6th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Exeter, 1962, p 703.
- [12] Kinch M. A. and Buss D. D., *J. Phys. Chem. Solids*, 32 Suppl., 1 (1971), 461.
- [13] Kahlert H. and Bauer G., *Phys. Rev. Lett.*, **30** (1973), 1211.
- [14] Weber B. A., Sattler J. P. and Nemanich J., *Appl. Phys. Lett.*, **27** (1975), 93.
- [15] Poehler T. O. and Apel J. R., *Phys. Lett.*, **A32** (1970), 268.
- [16] Verie C., Decamps E., *Phys. Stat. Sol.*, **9** (1965), 797.
- [17] Long D., *Phys. Rev.*, **176** (1968), 923.
- [18] Suizu K. and Narita S., *Solid State Commun.*, **10** (1972), 627.
- [19] Narita S., Kim R. S., Ohtsuki O. and Ueda R., *Phys. Lett*, **35 A** (1971), 203.
- [20] Schmit J. L. and Stelzer E. L., *J. Appl. Phys.*, **40** (1969), 4865.
- [21] Wiley J. D. and Dexter R. N., *Phys. Rev.*, **181** (1969), 1181.
- [22] Sosnowski L. and Galazka R. R., *Proc. Inter. Conf. Phys. of II-VI Semiconductors*, Providence, 1967.

EFFECTIVE MASS OF ELECTRONS IN CONDUCTION BAND OF $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ SEMICONDUCTORS

CHU JUNHAO

(Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

A formula for calculating the effective mass of electrons at the bottom of conduction band is derived as $m_0^*/m_0 = 0.05966 E_g(E_g+1)/(E_g+0.667)$, by taking Kane's mode and the energy band parameters obtained from the best fit between theoretical and experimental intrinsic absorption curves for very thin samples of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Then the effective mass of electrons in conduction band at the wave vector k may be calculated by the expression $(m^*/m_0) = (m_0^*/m_0) \sqrt{1 + 8P^2 \hbar^2 / 3E_g^2}$. The calculated results agree well with the experimental ones.