

分子束外延 PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 量子阱 持续光电导与导带不连续

宋 航 陈伟立 史智盛 傅 义

(中国科学院长春物理研究所, 吉林, 长春, 130021)

摘要: 从理论和实验上研究了分子束外延生长的 PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 多量子阱结构材料中的持续光电导过程. 认为材料中持续光电导的衰减是依赖于隧穿协助的电子-深中心复合过程. 理论计算与实验结果一致. 通过对持续光电导衰减规律的理论拟合, 得到了 PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 量子阱材料的导带不连续值及两类能谷间的能量差.

关键词: PbTe/PbSnTe, 分子束外延, 光电导, 隧穿复合.

引言

半导体中持续光电导现象在器件中产生的新效应已有报道^[1,2]. 目前对于半导体材料持续光电导过程的研究主要集中在异质界面处的低维电子气行为^[3]、具有 n-i-p-i 结构的掺杂超晶格^[4]、调制掺杂的异质结构材料中的电子行为^[5]、以及讨论半导体材料中深能级的行为特性^[6]等方面. 针对不同的研究对象人们提出了多种模型及相应的理论. 本文通过研究隧穿协助的电子-深中心复合过程, 分析了 MBE 生长的 PbTe/PbSnTe 多量子阱结构中的持续光电导过程, 并由此得到了 PbTe/PbSnTe 界面导带的不连续值 ΔE_c .

1 理论分析

对于图 1 所示的量子阱能带, 由于在 PbTe 势垒层中存在激活能为 E_T 的深电子陷阱中心, 该中心俘获的电子可以通过吸收 $h\nu > E_T$ 的光子而进入 PbTe 导带 a . 由于能带的不连续, 电子将向 PbSnTe 势阱中注入 b 以实现体系新的平衡, 从而改变势阱中准二维电子气的浓度, 引起光电导现象. 同时, 势阱中的电子又通过隧穿进入势垒 c , 重新被深中心 d 俘获. 由于势阱中的电子与势垒中的深中心在空间上分开, 则光照停止后光电导的衰减十分缓慢, 产生持续光电导现象.

对于这一光电导过程的理论处理, 可采用 W.K.B. 近似求出电子在势垒中的波函数.

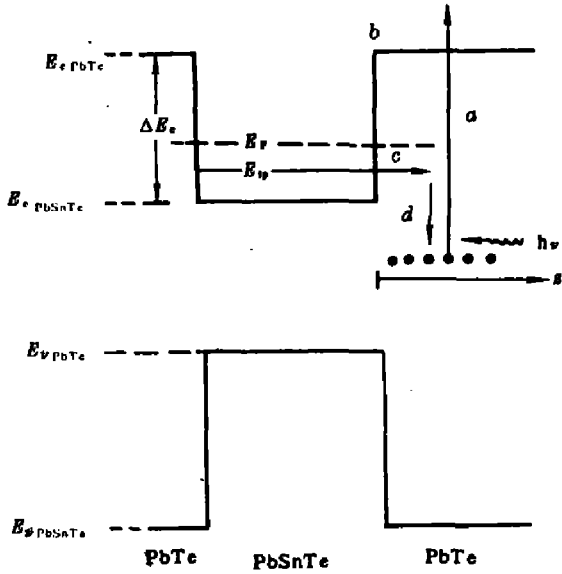


图1 PbTe/PbSnTe量子阱结构材料的能带图和隧穿复合模型

Fig. 1 Schematic band diagram of PbTe/PbSnTe quantum well and the principle of tunneling-assisted recombination at the interface

铅盐半导体材料，由于导带与价带间的耦合，色散关系不再为抛物线形，而变为线性色散关系^[7]，即

$$\frac{1}{2} k^2 m^{-1} \vec{k} \cdot \vec{k} = E(1 + E / E_g).$$

式中 \vec{k} 为波矢量， E 为以导带边为基准的能量， E_g 为禁带宽度。一维情况下， \vec{k} 可以用 k 表示， m 取为电子有效质量 m^* ，并设 $-E_g/2 < E < E_g/2$ ，则有

$$k_{ip} = \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{1/2} [(\Delta E_{cp} - E_{ip}) + (\Delta E_{cp} - E_{ip})^2 / E_g]^{1/2}. \tag{2}$$

电子被深中心俘获的几率为

$$\tau_{i\rho}^{-1} = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{ip}(Z') \delta(Z' - Z) dZ' \right|^2 = \tau_{0i\rho}^{-1} \exp\{-2k_{ip}Z\}.$$

式中 $\tau_{0i\rho}^{-1}$ 的涵义为：在界面处，阱中 ($Z \rightarrow 0^-$) 第 ρ 个能谷中第 i 个子能带的电子被垒中 ($Z \rightarrow 0^+$) 的深中心俘获的几率。

对于 PbTe 和 PbSnTe 材料，导带极小在布里渊区 L 点，导带拥有 4 个能谷，考虑各个能谷和子能带电子的贡献，光照停止后，势阱中准二维电子气浓度的变化速率方程为

$$\frac{d\Delta n(t, Z)}{dt} = -\frac{1}{4} \left(\sum_{\rho} \sum_i \tau_{i\rho}^{-1} \right) \Delta n(t, Z). \tag{3}$$

式 (3) 中 ρ 为能谷标记， i 为子能带量子数。若认为深中心分布均匀，其浓度为 N_T ，并考虑一维情况初始条件 $\Delta n(0) = N_T W_D$ 。求解式 (3) 并对全部位置积分，得

如果假定深中心是定域的，并忽略深中心间的相互作用，则深中心态可以用 $\delta(Z' - Z)$ 函数描述。同时，若深中心具有很大的俘获截面，则俘获电子的几率也很大，通过计算势垒中电子波函数与深中心态波函数的交叠积分，即可得到电子被深中心俘获的几率。

采用一维近似，并忽略由于深中心电离引起的能带弯曲，取 PbTe/PbSnTe 界面为坐标零点，由 W.K.B. 方法得到第 ρ 个能谷中第 i 个子能带的电子在势垒层耗尽区的波函数为

$$\psi_{ip}(Z) = A_{ip} \exp\left\{-\int_0^Z k_{ip}(Z) dZ\right\}, \quad 0 < Z < W_D. \tag{1}$$

式 (1) 中 W_D 为耗尽层宽度， k_{ip} 为电子波矢。由图 1 得势垒高度 $E_{Bip} = \Delta E_{cp} - E_{ip}$ ，则电子波矢可由色散关系求得。对于窄禁带

$$\frac{\Delta n(t)}{\Delta n(0)} = \frac{1}{W_D} \int_0^{W_D} \exp\left\{-\frac{t}{4} \sum_{\rho} \sum_i \frac{1}{\tau_{0i\rho}} \exp[-2k_{i\rho}Z]\right\} dZ. \quad (4)$$

其中耗尽层宽度 W_D 可利用对同型突变异质结耗尽层的讨论由下列关系确定:

$$V_D = \frac{E_{F_2} - E_{F_1}}{q} = \frac{(E_{F_2} - E_{C_2}) + [\Delta E_c - (E_{F_1} - E_{C_1})]}{q},$$

$$V_{D1} \approx \frac{k_B T \varepsilon_2 N_{D2}}{q \varepsilon_1 N_{D1}} \left[\left(1 + \frac{2q \varepsilon_1 N_{D1} V_D}{k_B T \varepsilon_2 N_{D2}} \right)^{1/2} - 1 \right],$$

$$V_D = V_{D1} + V_{D2},$$

$$W_D = \left[\frac{2\varepsilon_2 V_{D2}}{q N_{D2}} \right]^{1/2}.$$

以上各式中 V_D 为内建电势, E_{F_1} 、 E_{F_2} 、 ε_1 、 ε_2 、 N_{D1} 、 N_{D2} 、 V_{D1} 、 V_{D2} 分别为 PbTe 和 PbSnTe 材料的费密能级、介电常数、掺杂浓度和电势, k_B 为波尔兹曼常数, q 为电子电荷, T 为绝对温标.

根据 Simpson 法则采用数值积分对式 (4) 求解. 如果只有最低的能态被占据, 而且 4 个能谷完全等价, 则有

$$\frac{\Delta n(t)}{\Delta n(0)} = \frac{1}{W_D} \int_0^{W_D} \exp\left\{-\frac{t}{\tau_{01}} \exp[-2k_1 Z]\right\} dZ, \quad (5)$$

由式 (2), 选择不同的参数 $\Delta E_0 - E_1$ (即不同的 k_1) 和 τ_{01} 对式 (5) 计算, 结果如图 2 所示.

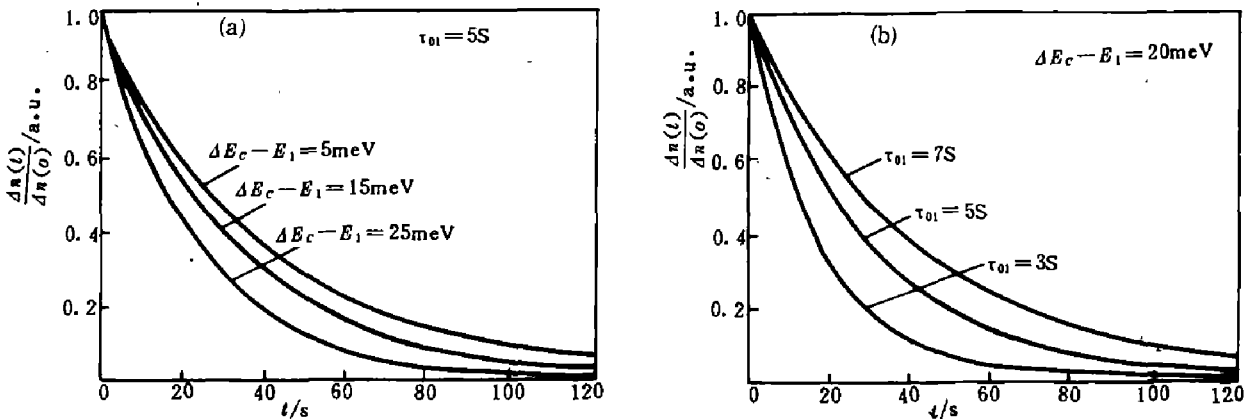


图 2 (a) 不同参数 $\Delta E_0 - E_1$ 和 (b) 不同时间常数 τ_{01} 载流子浓度衰减理论曲线

Fig. 2 Theoretical decay curves of the carrier concentration for various $\Delta E_c - E_1$ (a) and various τ_{01} (b)

2 实验

利用 MBE 技术, 在 BaF₂[111] 衬底上首先生长一层 2 μm 厚的 PbTe 缓冲层, 然后交替生长 30 nm 的 PbTe 和 PbSnTe 层, 得到 PbTe/Pb_{1-x}Sn_xTe 多量子阱结构. 生长时选用 PbTe, PbSnTe 及金属 Pb 作为生长束源, 其生长速率为 1.5 $\mu\text{m}/\text{h}$. 外延生长过程中系统的真空度优于 1.1×10^{-6} Pa, 衬底温度为 350°C. 各 PbTe、PbSnTe 层均为非故意掺

杂 N 型, 载流子浓度为 $5 \times 10^{17} \sim 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ 组份 x 的控制是靠严格控制各个束源温度及衬底温度来实现. 实验中所用样品为 15 个周期的 $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ 多量子阱结构, 分析结果确定其组份 $x = 0.12$.

光电导的测量是选用 800 K 标准黑体辐射源作为光源, WDS-3 型光栅单色仪分光, 以使照射到样品表面上的激发光为单色光. 样品置于带有 ZnSe 窗口的低温杜瓦瓶中. 通过监测关闭激发源后光电导信号随时间的变化测得光电导衰减.

3 结果和讨论

3.1 $\text{PbTe}/\text{Pb}_{0.88}\text{Sn}_{0.12}\text{Te}$ 的能带类型

目前人们对 $\text{PbTe}/\text{PbSnTe}$ 量子阱的能带结构类型持不同观点. 一种看法认为具有 I 型能带结构^[8,9], 其主要依据是对 $\text{PbTe}/\text{PbSnTe}$ 结构材料中各层应力的研究结果, 以及由相关反斯托克斯喇曼散射、回旋共振、磁光等研究结果. 另一种看法基于对自由载流子光吸收引起吸收边的移动及对材料中深能级的研究, 认为 $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ 量子阱在 $x < 0.4$ 时将具有 I' 型能带结构^[10,11]. 也有人认为不同的生长条件可以形成不同类型的能带结构^[12]. 我们的早期工作通过弱场霍尔效应判断我们生长的 $\text{PbTe}/\text{Pb}_{0.88}\text{Sn}_{0.12}\text{Te}$ 量子阱结构的能带类型为 I 型^[13].

3.2 PbTe 势垒层中的深电子陷阱中心

K. Lischka 和 W. Huber^[14]通过对 PbTe 单晶薄膜光电导衰减时间常数随温度的变化规律及对 PbTe 激光光谱的研究, 首次确定了在 PbTe 导带下存在一个激活能 $E_T = 75 - 0.38T$ (meV) (T 为绝对温度) 的深电子陷阱中心, 并确定 PbTe 中载流子寿命为 $5 \times 10^{-5} \sim 1 \times 10^{-6} \text{ s}$ (50~200 K). A. N. Kovaler^[15]等人的近期研究结果证实在 PbTe 中存在着多个深能级, 并认为可能是由于缺陷引起的. 我们分别测量了 $\text{BaF}_2[111]$ 衬底上 MBE 生长的单层 PbTe 和 PbSnTe 样品的光电导衰减时间常数随温度的变化, PbTe 样品的结果与文献报道一致, 其深中心浓度约在 $2 \sim 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 范围, 而单层 PbSnTe 材料的光电导衰减时间在 10^{-6} s 以内 (77 K).

3.3 $\text{PbTe}/\text{Pb}_{0.88}\text{Sn}_{0.12}\text{Te}$ 多量子阱中的持续光电导

实验表明, 低温下 $\text{PbTe}/\text{PbSnTe}$ 多量子阱结构材料光电导的衰减时间远大于 PbTe 和 PbSnTe 单层材料. 基于以上两点和本文理论分析, 我们用隧穿协助的电子-深中心复合过程来处理 $\text{PbTe}/\text{Pb}_{0.88}\text{Sn}_{0.12}\text{Te}$ 多量子阱材料的光电导.

当 $E_g > h\nu > E_T$ 的光电子激发 PbTe 势垒层中陷阱中心的电子时, 在耗尽层近似下, 耗尽层以内的非平衡电子将向 PbSnTe 势阱中注入, 而耗尽层以外的电子将在小于 10^{-5} s 时间内被深中心重新俘获. 由于电子与耗尽层内的陷阱中心 (相当于受主) 在空间上分开, 势阱中的电子只能通过隧穿与“受主中心”复合, 这一过程可以是十分缓慢的. 如果势垒高度同费密能级相比充分大, 并考虑能带的非抛物线性, $\text{PbTe}/\text{PbSnTe}$ 量子阱中子能带能量为^[16]

$$E_i = \frac{1}{2} \left[-E_g + \sqrt{E_g^2 + \frac{2h^2}{m_z} \left(\frac{i\pi}{d} \right)^2 E_g} \right]. \quad (6)$$

式 (6) 中 i 为子能带量子数, E_g 为 PbSnTe 禁带宽度, m_z 为生长方向电子有效质量, d 为势阱宽. 由于沿 [111] 方向生长, 考虑 PbTe 和 PbSnTe 材料的导带极小在布里渊区 L 点, 这样在形成 PbTe/PbSnTe 量子阱结构时, 由于两种材料间晶格常数的差异, 使得 PbSnTe 材料中 4 个能谷所受应力不同而形成两类能谷. 其一为主轴平行于 [111] 方向的 a 谷, 其简并度为 1; 另一类为其它方向的 b 谷, 其简并度为 3. a 谷能量比 b 谷能量约低 $10 \sim 14 \text{ meV}$ ^[12,17].

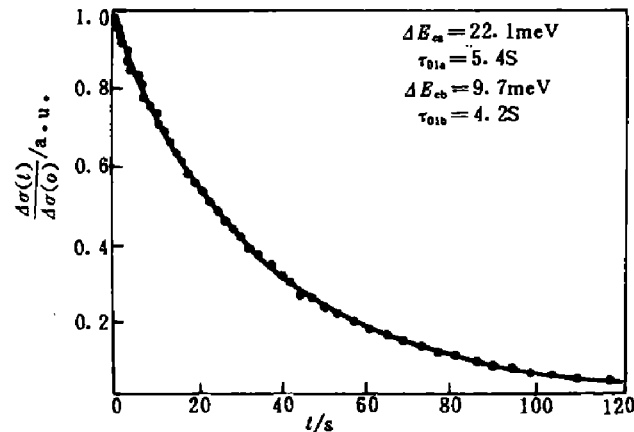


图 3 低温 (10K) 下 PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 量子阱结构材料的光电导衰减 (实线为如图上参数计算的理论曲线, 圆点为实验点)

Fig. 3 Decay of the photoconductivity of PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te multi-quantum wells at low temperature (10K)

(The solid line is the result of theoretical calculation using the parameters given in the figure, the dotted line is the experimental data)

考虑在低温下 (10 K), 设两类能谷中都只有最低的子能带被电子占据, 计及不同能谷电子有效质量不同^[13], 并且电子迁移率不为时间的函数, 则 $\frac{\Delta\sigma(t)}{\Delta\sigma_0} = \frac{\Delta n(t)}{\Delta n_0}$, 应用式 (2)、(4)、(6), 选择参数 ΔE_{ca} 、 ΔE_{cb} 、 τ_{01a} 和 τ_{01b} 对实验值进行拟合, 结果如图 3. 最佳拟合结果确定 [111] 方向的 a 谷导带不连续值 $\Delta E_c = 22.1 \text{ meV}$, a 谷比 b 谷能量约低 12.4 meV , 与文献[12]一致.

4 结论

对分子束外延生长的 PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 多量子阱结构材料的持续光电导进行了理论处理, 认为这一过程为隧穿协助的电子-深中心复合过程. 理论与实验相符合. 并且通过模拟低温下 PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 多量子阱持续光电导衰减过程, 得到 PbTe 与 Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te 界面导带不连续值及两类能谷间的能量差.

致谢: 作者对金亿鑫研究员、陈一民同志对本工作提供的帮助表示衷心的感谢.

参考文献

- 1 Sheinkman M K et al. *Sov. Phys. Semicond.*, 1976,**10**:128
- 2 Birrittella M S et al. *IEEE Trans. Electron Devices*, 1984,**ED-29**:1135
- 3 Stormer H L et al. *Solid State Commun.*, 1979,**29**:750
- 4 Agarwal S C et al. *Phys. Rev.*, 1985,**B31**:5547
- 5 Schubert E F et al. *Phys. Rev.*, 1984,**B29**:4562
- 6 Theodorou D E et al. *Appl. Phys. Lett.*, 1982,**41**:628
- 7 Heremans J et al. *Appl. Phys. Lett.*, 1986,**48**:644
- 8 Pascher H et al. *Sur. Sci.*, 1986,**170**:657
- 9 Ambrosch K E et al. *Sur. Sci.*, 1984,**142**:571
- 10 Ishida A et al. *Jap. J. Appl. Phys.*, 1985,**24**:956
- 11 Murase K et al. *Superlattices and Microstructures*, 1985,**1**:177
- 12 Kriechbaum M et al. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1988,**24**:1727
- 13 史智盛等. *红外研究*, 1990,**9**:255
- 14 Lischka K et al. *Solid State Electron.*, 1978,**21**:1509
- 15 Kovalev A N et al. *Sov. Phys. Semicond.*, 1989,**23**(6):606
- 16 Takaoka S et al. *Solid State Commun.*, 1986,**58**:637
- 17 Kriechbaum M et al. *Phys. Rev.*, 1984,**B30**:3394

PERMANENT PHOTOCONDUCTIVITY AND BAND OFFSETS IN PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te MULTI-QUANTUM WELLS GROWN BY MBE

Song Hang, Chen Weili, Shi Zhisheng, Fu Yi

(Changchun Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130021, China)

Abstract: The low temperature permanent photoconductivity in PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te multi-quantum wells grown by molecular beam epitaxy was studied both theoretically and experimentally. The decay of the photoconductivity was analyzed in terms of tunneling-assisted electron-trap recombination. The theoretical result agrees with the experimental one. The band offsets of both the [111] valley and the others at PbTe/Pb_{0.88}Sn_{0.12}Te interfaces were estimated by fitting the calculated decay curve of the photoconductivity to the experiment data.

Key words: PbTe/PbSnTe, molecular beam epitaxy, photoconductivity, tunneling-assisted recombination.