

p 型 $\text{Hg}_{0.76}\text{Cd}_{0.24}\text{Te}$ 的子能带结构

刘 坤 褚君浩 程思远* 汤定元

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海, 200083)

摘要 制备了 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x=0.24$) MIS 器件, 用自制的高精度差分电容谱仪测量了器件的 $C-V$ 谱. 根据褚君浩等提出的实验模型拟合测得的电容谱, 获得了反型层电子子能带结构, 与本文的修正变分自洽方法计算结果基本一致. 并获得了有关界面态与绝缘层固定电荷的结果.

关键词 电容谱, 反型层, 子能带结构.

引言

电容-电压 ($C-V$) 谱测量技术是研究半导体器件的有效手段. 该方法不仅可以获得器件近表面的纵向掺杂、界面态以及绝缘层电荷等信息, 还可加深对载流子寿命以及载流子在表面复合的了解^[1]. 对于窄禁带半导体, Mosser^[2]发现经典理论不能很好解释其 MIS 器件 $C-V$ 特性, 认为必须考虑到反型层子能带量子化和子能带电子态密度低两大特点. 子能带量子化使反型阈值电压被推迟, 低的子能带电子态密度使反型区电容饱和速度放慢, 这些特点都是宽带半导体 MIS 结构 $C-V$ 特性所不具有的. 近来, 人们根据这些特点对窄禁带半导体 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的子能带结构作了不少研究^[3~8], 获得了许多有意义的结果. 褚君浩^[4]首次建立了一个实验模型, 研究了反型层子能带基态能量 E_0 与掺杂浓度 N_{ad} 、反型层电子浓度 N_s 的关系, 并在 $x=0.21$ 的高掺杂 ($N_{ad} > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) p 型 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料中发现一个位于导带边以上约 45 meV 处的共振缺陷态. 尽管如此, 多带模型理论仍无法解释这些实验结果. 为此, 我们修正了变分自洽理论并给出了与实验符合较好的计算结果^[9]. 本文测量了 $\text{Hg}_{0.76}\text{Cd}_{0.24}\text{Te}$ MIS 结构 $C-V$ 谱, 用褚君浩^[4,5]等提出的模型对之进行了拟合, 得到了有关反型层子能带结构的信息, 并与修正后的变分自洽理论计算结果作了比较, 两者符合较好.

1 理论分析

1.1 实验模型^[4,5]

* 中国科学院上海技术物理研究所, 上海, 200083

本文 1993 年 7 月 13 日收到, 修改稿 1994 年 1 月 10 日收到

在反型层中只有一个子带被电子填充 (即量子极限) 的情况下, 可用以下一组方程替代一维泊松方程和薛定谔方程描述 p 型 HgCdTe MIS 器件反型子能带结构:

$$\frac{d\Phi(z)}{dz} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_s \epsilon_0}, \quad (1)$$

$$E_0 = E_{00} + E_{01}N_s + E_{02}N_s, \quad (2)$$

$$j = \frac{Z_{av}}{Z_i}, \quad (3)$$

$$N_s = \int \frac{m^*(E)}{\pi \hbar^2} dE, \quad (4)$$

$$e\Phi_s = E_F + (E_g - E_A). \quad (5)$$

其中

$$\rho(z) = \rho_s(z) + \rho_{\text{dep}}(z),$$

$$\rho_s(z) = -eN_s/Z_i,$$

$$\rho_{\text{dep}}(z) = \begin{cases} -eN_{ad}, & (0 < z < Z_d) \\ 0, & (z > Z_d) \end{cases}$$

式中各参数的物理意义见表 1. 由该组方程可求得半导体 MIS 结构表面电容为

$$C_s = e \left(\frac{\partial N_s}{\partial \Phi_s} + N_{ad} \frac{\partial Z_d}{\partial \Phi_s} \right). \quad (6)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial Z_d}{\partial \Phi_s} &= \frac{1}{2N_{ad}Z_d + N_s} \left(\frac{2\epsilon_0\epsilon_s}{e} + N_s \frac{\partial(Z_d - Z_i)}{\partial \Phi_s} - Z_i \frac{\partial N_s}{\partial \Phi_s} \right), \\ \frac{\partial(Z_d - Z_i)}{\partial \Phi_s} &= \epsilon_0\epsilon_s \frac{1 - \frac{\partial E}{\partial N_s} - \frac{\partial N_s}{\partial \Phi_s}}{eN_{ad}(Z_d - Z_i)}, \\ \frac{\partial N_s}{\partial \Phi_s} &= e \frac{1 + 2\frac{E_F - jE_0}{E_g}}{\frac{\pi \hbar^2}{m_0^*} + \frac{(E_{01} + 2E_{02}N_s)(1 + 2E_0 - 2jE_0 - jE_F)}{E_g}}, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

$$E_{00} = C_i^2 \frac{(V_t - V_{fb})^2}{2\epsilon_s \epsilon_0 N_{ad}} - E_g + E_A, \quad (8)$$

$$E_A = 0.0165 - 2.4E - 8\sqrt{N_{ad}}, \quad (9)$$

$$E_F = -\frac{E_g - 2jE_0}{2} + \sqrt{\frac{(E_g - 2jE_0)^2}{4} + E_0(E_g + E_0 - 2jE_0) + \frac{E_g \pi \hbar^2 N_s}{m_0^{*2}}}, \quad (10)$$

$$m^*(E) = \left[1 + \frac{2(E - E_0j)}{E_g} \right] \cdot \frac{0.05966E_g(E_g + 1)}{E_g + 0.667} m_0. \quad (11)$$

式 (11) 方括号后面的项即为导带底电子有效质量 m_0^* , 其中常数 0.05966 的量纲为 eV^{-1} , 常数 0.667 的量纲为 eV . 测得的电容是半导体表面电容与绝缘层电容的串联电容值, 即 $C = C_i \cdot C_s / (C_i + C_s)$, 由互可拟合实验结果. 拟合时调节参数为: 反型层基态子能带能量参数 E_{01} 和 E_{02} 、平带电压 V_{fb} 或绝缘层电容 C_i 、波函数分布参数 j . 下文将给出拟合结果及有关子能带结构参数.

表 1 本文参数物理意义
Table 1 Physical meaning for the parameters in this paper

$\Phi(z)$	距表面 z 处电势	j	波函数分布参数
$e\Phi_s$	表面能带总弯曲量	$D(E)$	子能带电子态密度
E_g	禁带宽度	m_0	自由电子质量
E_0	基态子能带能量	m_0^*	导带底电子有效质量
E_{00}	基态子能带阈值能量	$m^*(E)$	反型层子能带电子有效质量
E_{01}	基态子能带能量参数	Me	反型层子能带电子平均有效质量
E_{02}	基态子能带能量参数	ϵ_s	HgCdTe 相对介电常数
E_F	费密能级	ϵ_0	真空介电常数
E_A	受主电离能	N_A	受主浓度
Z_{av}	子能带电子平均分布位置	N_D	施主浓度
Z_i	反型层厚度	N_{ad}	有效受主浓度
Z_d	耗尽层厚度	N_s	反型层子能带电子面密度
$\rho(z)$	电荷体密度	C_i	绝缘层电容
Z_{depl}	耗尽层有效受主面密度	V_{fb}	平带电压
V_{t0}	反型阈值电压		

1.2 变分自洽理论修正

考虑到窄禁带半导体 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 带间相互作用所引起的非抛物带结构、波函数平均效应以及电场在屏蔽长度内的衰减, 儿略共振缺陷态、Zener 隧穿等因素, 在有效质量近似下, 可用以下一组自洽方程求解 p 型 HgCdTe MIS 器件反型层子能带结构:

$$e\Phi_s = E_g - E_A + E_F, \quad (12)$$

$$N_{depl} = 1.053 \times 10^3 \sqrt{\epsilon_s N_{ad} \Phi_s}, \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned} \delta E_0 &= -1.207 \times 10^{-6} \frac{N_{ad} Z_i^2 (N_{depl} + 11N_s/96)}{(N_{depl} + 11N_s/32)/\epsilon_s}, \\ E'_0 &= 2.66 \times 10^{-9} \left(\frac{1/\sqrt{Me/m_0}}{\epsilon_s} \right)^2 \frac{N_{depl} + 55N_s/96}{\sqrt[3]{N_{depl} + 11N_s/32}}, \\ E_0 &= E'_0 + \delta E_0. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

式中 E'_0 和 δE_0 为中间量, 量纲为 eV , Me 为反型层子能带电子平均有效质量, 定义为距导带底 $(E_F - E_0/4 + (E_0 - j \cdot E_0))$ 处电子有效质量. 其它各物理量意义见表 1, 单位为

cm·g·s 制.

2 实验结果

我们将组份 $x=0.24$ 的 p 型 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 体材料样品研磨、抛光、腐蚀后, 直接在其表面蒸上一层约 2000\AA 的 ZnS 绝缘层, 然后通过光刻、蒸金、剥离, 制成 MIS 器件. 电极面积为 0.0491 mm^2 . 用导电银胶将器件固定在样品架上, 用金丝作引线, 欧姆接触良好.

将器件装入杜瓦瓶, 用自制高精度差分电容谱仪在 80 K 和暗背景下测量了器件 $C-V$ 谱, 测量原理见文献 [10]. 测量小信号频率为 56.6 kHz , 幅度为 10 mV (满足小信号要求), 直流偏压扫描速度为 120 mV/s . 测量结果呈低频特性 (参见图 1 中实线).

由图 1 $C-V$ 谱可看出电容在反型区饱和和速度较慢, 这正是窄禁带半导体 MIS 器件的 $C-V$ 特性. 采用褚君浩等^[4,5]提出的模型拟合了 $C-V$ 实验结果, 拟合参数为: $C_i = 5.65\text{ pF}$, $V_{fb} = -1.45\text{ V}$, $V_{t0} = 3.05\text{ V}$, $N_{ad} = 3 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$, $j = 0.612$, $E_{00} = 68.04\text{ meV}$, $E_{01} = 1.6 \times 10^{-13}\text{ eV}\cdot\text{cm}^2$, $E_{02} = -8.6 \times 10^{-26}\text{ eV}\cdot\text{cm}^2$, 拟合结果见图 1 中虚线. 由此得到的反型层子能带结构参数包括费密能级 E_F 、电子基态能量 E_0 、有效质量 $m^*(E_0)/m_0$ 和 $m^*(E_F)/m_0$ 、耗尽层和反型层厚度 Z_d 和 Z_i 以及它们随反型层电子浓度的变化关系, 分别见图 2、3、4、5 中实线, 图 2~5 中虚线为修正后的变分自治理论计算结果.

从图 2 可看出, $N_s = 0$ 时, $E_0 = 68.04\text{ meV}$. 这说明只有当能带弯曲量达到 $E_g + 68.04\text{ meV}$ 时, 表面才开始反型并填充电子. 随着反型层内电子浓度 N_s 从 0 增加到 $2 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$, E_0 和 E_F 分别由 68 meV 增加到 97.40 meV 和 121.70 meV ; E_0 和 E_F 处有效质量分别由 $0.0186m_0$ 增加到 $0.020m_0$ 和 $0.024m_0$ (参见图 3); 耗尽层厚度从 1078.50\AA 增加到 1223.6\AA (参见图 4); 而反型层厚度则从 201\AA 减小到 192.7\AA (参见图 5), 基本保持不变. 由于样品掺杂浓度较低, 耗尽层厚度比反型层厚度要大的多. 由图可知修正后的变

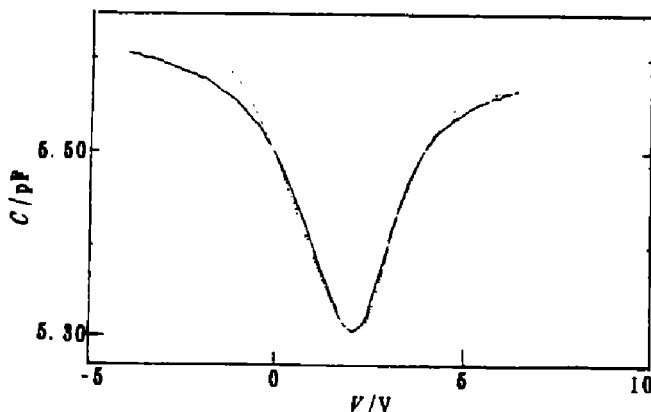


图 1 p 型 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x=0.24$) MIS 结构电容谱 ($T=80\text{ K}$, $f=56.6\text{ kHz}$, 实线为测量结果, 虚线为褚君浩实验模型拟合结果)

Fig. 1 $C-V$ spectroscopy for p-type $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x=0.24$) MIS structure at $T=80\text{ K}$ and $f=56.6\text{ kHz}$

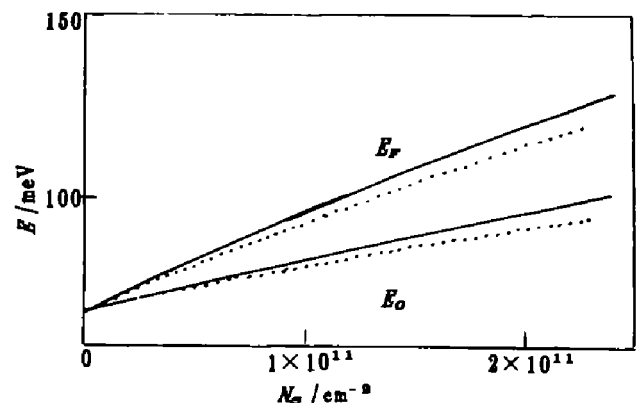


图 2 反型层基态能量、费密能级随反型层电子面密度的变化关系 (实线为实验拟合结果, 虚线为修正后的变分自治理论计算结果)

Fig. 2 The dependence of ground state and Fermi level on the electron concentration in the inversion layer

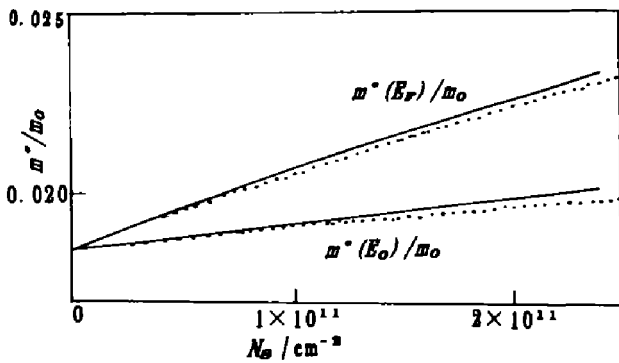


图 3 反型层基态能量、费密能级处电子有效质量随反型层电子面密度的变化关系 (实线为实验拟合结果, 虚线为修正后的变分自洽理论计算结果)
Fig. 3 The relations of electron effective mass at the ground state and Fermi level with the electron surface concentration in the inversion layer

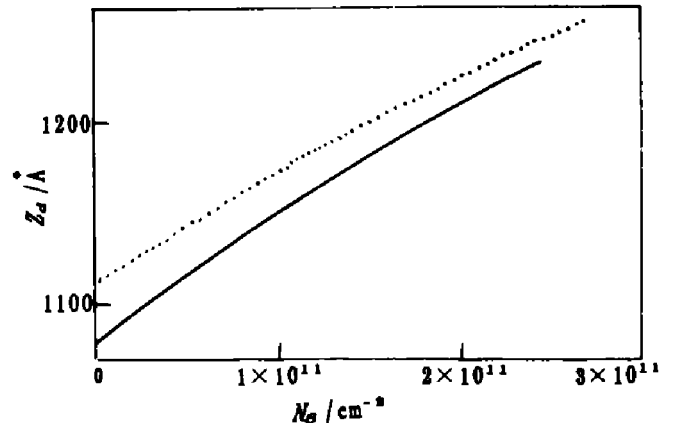


图 4 耗尽层厚度随反型层电子面密度的变化关系 (实线为实验拟合结果, 虚线为修正后的变分自洽理论计算结果)
Fig. 4 The relation of depletion layer thickness with the electron surface concentration in the inversion layer

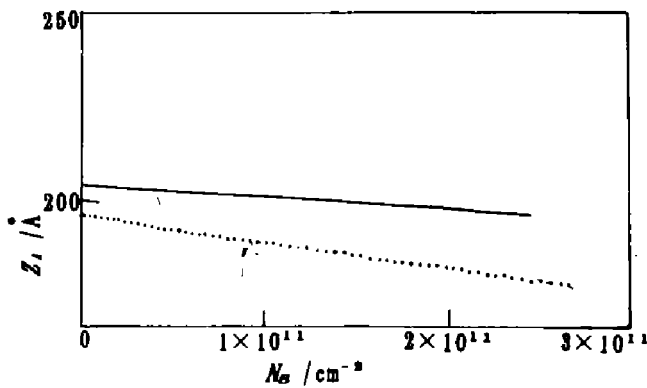


图 5 反型层厚度随反型层电子面密度的变化关系 (实线为实验拟合结果, 虚线为修正后的变分自洽理论计算结果)
Fig. 5 The relation of inversion layer thickness with the electron surface concentration in the inversion layer

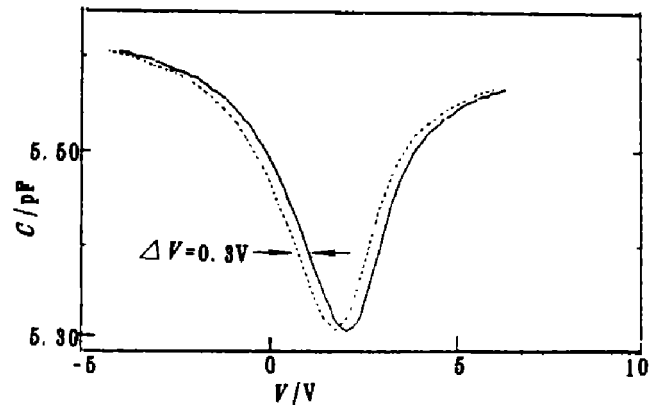


图 6 偏压正反向扫描时的电容谱 (实线为正向扫描, 虚线为反向扫描)
Fig. 6 C-V spectroscopy with bias voltage scanned forward and backward

分自洽理论计算结果与实验结果符合较好.

图 6 为偏压正、反向扫描时的 C-V 谱. 可见电容在电压轴上有滞后效应, 约为 0.3 V, 在电容轴上没有上下位移. 电压滞后效应是由离 ZnS-HgCdTe 界面较远的慢界面态贡献所致, 忽略其它影响, 估算出器件中慢界面态密度约为 $2.1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. 由耗尽区平直部分外推直线与绝缘层电容 C_i 的交叉处电压得到平带电压的实验值为 -1.45 V , 而由理论平带电容 ($C_{FB} = \sqrt{2} \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_2 / L_D$) 得到平带电压为 -1.6 V , 这表明绝缘层中存在荷电为正的固定电荷, 密度约为 $1.24 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. 可见慢界面态和固定电荷密度都是比较小的.

3 讨论

实际 MIS 器件中存在许多不稳定因素, 如 MIS 器件中衬底近表面的载流子分布、补偿和涨落、界面处与导带价带交换电子的表面态、绝缘层厚度不均匀导致的半导体表面势不均匀、交流小信号幅度、测试背景涨落等. 这些不稳定因素使得某一偏压处被测电容是一统计平均结果, 这在反型阈值电压附近尤其明显. 当第一子带开始填充电子时, 测得电容不是迅速跃变, 而是平滑地上升, 因此测得的 $C-V$ 谱是一条比较平滑且稍有展宽的曲线. 引入高斯分布进行平滑拟合是合理的.

表面阳极氧化会改善 n 型 HgCdTe MIS 器件的特性^[11,12], 但对 p 型 HgCdTe MIS 器件来说, 阳极氧化不仅会引入电荷使器件表面反型, 而且会引入界面态使器件性能大大降低. 所以我们在制备 p 型 HgCdTe MIS 器件过程中没有采用阳极氧化工艺. 测量结果表明界面态较小, 约 $2.1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, 但器件稳定性降低了. 对同一 p 型 MIS 器件的第二次测量 (置于干燥器皿内 2 个月后) 发现器件有导电类型变化的趋势, 这是因为器件表面稳定性差而在空气中逐渐反型的缘故. 尽管在表面有一层 ZnS 绝缘保护膜, 但由于 ZnS 较薄 (2000Å 左右), 而且膜本身有针孔, 因此器件长期置于空气中易于被氧化而反型. 另外, 衬底中 Hg 元素不稳定也是器件稳定性差的原因之一. 为了增大 p 型 HgCdTe MIS 器件表面的稳定性, 表面阳极硫化是必要的.

我们用霍尔测量得到的材料掺杂浓度 N_{ad} 为 $4.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, 而由 $C-V$ 测量得 N_{ad} 为 $4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, 明显小于霍尔测量结果. 在其它 p 型 HgCdTe MIS 器件测量中也发现了这种情况. 由于 $C-V$ 测量结果是表面薄层内 (厚度约 1000Å) 的掺杂浓度, 因此界面态和表面反型都会影响掺杂浓度的测量结果. 前者会使测量结果偏大, 这在我们的 p 型 InSb MOS 器件测量中已证实^[13], 而后者会使测量结果偏小. 本文结果表明 HgCdTe 表面反型是不可忽视的, 有时会取代界面态而严重影响器件性能, 这一点在薄膜材料霍尔测量中也得到了证实^[14]. 掺杂浓度测量误差另一来源是测试温度和小信号幅度.

参考文献

- 1 孙恒慧, 包宗明. 半导体物理实验, 北京: 高等教育出版社, 1985
- 2 Mosset V, et al. *Semicond. Technol.*, 1988,3:808~812
- 3 Beck JD, Kinch MA. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1982,21(1):172~175
- 4 褚君浩, Sizmann R, Koch F. *半导体学报*, 1990,11(5):332
- 5 Chu JH, Mi ZY, Sizmann R, et al. *Phy. Rev.*, 1991,44(4):1717
- 6 褚君浩, Sizmann R, Koch R. *中国科学*, 1990,A5:515
- 7 Sizmann R, Chu JH, Koch F. *Semicond. Technol.*, 1990,5:S111
- 8 Rosbeck JP, Haper ME. *J. Appl. Phys.*, 1987,62(5):1717
- 9 刘坤, 褚君浩, 汤定元. *物理学报*, 1994,43(2):268
- 10 褚君浩, Sizmann R, Wollrob R, et al. *红外研究*, 1989,8(5):327
- 11 Stahle CM, Helms CR. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1982,5(4):1092
- 12 Yang MJ, Yang CH, et al. *Appl. Phys. Lett.*, 1989,54(3):265
- 13 Liu Kun, Chu JH, Ou HJ, et al. to be published in J.A.P.
- 14 黄河, 郑国珍, 童斐明, 等. *红外与毫米波学报*, 1993,12(4):309

THE SUBBAND STRUCTURE OF p-TYPE $\text{Hg}_{0.76}\text{Cd}_{0.24}\text{Te}$

Liu Kun Chu Junhao Chen Siyuan* Tang Dingyuan

*(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)*

Abstract The MIS structure of p-type $\text{Hg}_{0.76}\text{Cd}_{0.24}\text{Te}$ bulk material was prepared and its capacitance-voltage characteristic was measured by using a self-established differential capacitance spectrometer. On the basis of Chu's experimental model, the experimental data were fitted and the subband structure in the n-type inversion layer was obtained. The experimental result is in good agreement with that calculated from the revised self-consistent theory.

Key words capacitance spectrum, inversion layer, subband structure.

*Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China