

分类号_____

密级_____

UDC _____

编号_____

中国科学院研究生院 博士学位论文

窄禁带半导体材料与器件研究

孙英会

指导教师 戴宁 研究员 张波 副研究员

中国科学院上海技术物理研究所

申请学位级别 理学博士 学科专业名称 微电子学与固体电子学

论文提交日期 2009年4月 论文答辩日期 2009年5月

培养单位 中国科学院上海技术物理研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 陈良尧 教授

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人创作的、已公开发表或者没有公开发表的作品的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本学位论文原创性声明的法律責任由本人承担。

学位论文作者签名：

孙英会

2009年6月3日

学位论文使用授权说明

本人同意：中国科学院上海技术物理研究所有权保留学位论文的印刷本和电子版，并采用影印、缩印、扫描、数字化或其它手段保存论文；有权提供目录检索以及提供本学位论文全文或者部分的阅览服务；有权按规定向国家有关部门或者机构送交论文的复印件和电子版；在不以赢利为目的的前提下，有权复制论文的部分或全部内容用于学术活动。

经指导教师审核，本学位论文属于保密，密级为：_____。涉密论文在解密后，以上学位论文使用授权说明适用。

论文作者签名：

孙英会

2009年6月3日

指导教师签名：

张奇

张波

年 月 日

分类号_____

密级_____

UDC _____

编号_____

中国科学院研究生院

博士学位论文

窄禁带半导体材料与器件研究

孙英会

指导教师 戴宁 研究员 张波 副研究员

中国科学院上海技术物理研究所

申请学位级别 理学博士 学科专业名称 微电子学与固体电子学

论文提交日期 2009 年 4 月 论文答辩日期 2009 年 5 月

培养单位 中国科学院上海技术物理研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 陈良尧 教授

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人创作的、已公开发表或者没有公开发表的作品的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本学位论文原创性声明的法律責任由本人承担。

学位论文作者签名：

年 月 日

学位论文使用授权说明

本人同意：中国科学院上海技术物理研究所有权保留学位论文的印刷本和电子版，并采用影印、缩印、扫描、数字化或其它手段保存论文；有权提供目录检索以及提供本学位论文全文或者部分的阅览服务；有权按规定向国家有关部门或者机构送交论文的复印件和电子版；在不以赢利为目的的前提下，有权复制论文的部分或全部内容用于学术活动。

经指导教师审核，本学位论文属于保密，密级为：_____。涉密论文在解密后，以上学位论文使用授权说明适用。

论文作者签名：

年 月 日

指导教师签名：

年 月 日

摘要

IV-VI 族铅盐和碲镉汞 (HgCdTe) 是两类重要的窄禁带半导体材料, 它们在红外激光器和红外探测器以及其他光电和热电器件中有着重要应用。同时, 由于窄带隙半导体材料的独特物理性质, 使得其在基础物理研究方面也占据着重要地位。本文就 IV-VI 族铅盐的物理性质及其器件物理和碲镉汞 (HgCdTe) 器件检测的相关内容展开讨论。

本论文首先对 PbSe 材料的一种重要三元合金 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的光学和电学性质进行分析。其后, 为了优化 IV-VI 族铅盐量子阱激光器的增益特性, 我们对 PbSe/ $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的增益性质进行了理论计算。除了上述内容, 本文的其他部分与 HgCdTe 器件有关。目前, HgCdTe 在材料生长和器件制备上目前还存在着严峻挑战。在进一步改进 HgCdTe 材料生长和器件制备工艺的同时, 开展对 HgCdTe 材料和器件的方便和无损的质量检测成为必要。因此, 本文中着重介绍一种非常适合检测 HgCdTe 材料和器件的非破坏性的光学测试手段——激光束诱导光电流 (Laser beam induced currents, LBIC) 方法——及其在 HgCdTe 器件结构检测中的应用。全文的主要内容如下:

1. 我们对在 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底上生长的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的光学和电学性质进行了分析。通过对变温透射光谱的拟合, 得到了禁带宽度 E_g 、展宽因子 Γ 、振子强度 A 等随温度的变化规律, 进而计算得到折射率 n 、和吸收系数 α 以及 Urbach 带尾参数 E_u 随温度的变化规律。从拟合得到的展宽因子 Γ 和带尾参数 E_u 的变温规律中发现, 相比于 III-V 族和 IV 族材料, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜中存在着较强的电子-声子相互作用。对 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜进行了 1.25 eV - 4.5 eV 范围内的室温反射测量和 1.5 eV - 4.5 eV 范围内的室温椭圆偏振光谱测量。发现在 Mn 含量不是很高的情况下, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料的高阶临界点与 PbSe 没有明显差别。Raman 测试结果显示 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 材料中只存在类 PbSe 的 Raman 峰。对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 进行了变温 Hall 测量, 得到了载流子浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况。

通过拟合迁移率谱 (MSA), 发现 $p\text{-Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜中除了空穴外, 还存在着少量表面或界面的二维电子。

2. 对 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的增益性质进行了理论计算。在 Kane's 模型 $k\cdot p$ 微扰方法理论框架下推导了带间跃迁动量矩阵元和约化态密度。计算所使用的增益表达式基于带间跃迁的费米-黄金法则, 忽略了带间弛豫过程。通过理论计算, 得到了 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱增益随阱结构参数以及温度等因素的变化情况。其中的阱结构参数包括量子阱的生长方向、阱宽和量子阱势垒材料的组分。

3. 利用激光束诱导光电流 (LBIC) 方法对一些 HgCdTe 器件结构进行了测试, 其中包括 HgCdTe n-on-p 结线列和 ICP 刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构。利用指数衰减模型从室温测得的 LBIC 信号中提取了结区外少子的扩散长度。对 HgCdTe n-on-p 结线列的变温 LBIC 测量结果进行了简单分析。

4. 利用激光束诱导光电流 (LBIC) 方法对 HgCdTe 长波红外 n-on-p 结线列的串音进行了测量和分析。在测量过程中, 采用 632.8 nm He-Ne 激光正入射器件表面。测量温度分别为液氮温度和室温。对实验得到的光电流曲线进行了定性分析, 并计算得到了相邻光敏元之间的串音。串音结果表明, 随着 pn 结之间的间距增大, 相邻 pn 结之间的串音呈指数衰减。对影响实验结果的因素也进行了讨论。另外, 对光敏元以外区域的串音情况进行了分析。

关键词: IV-VI 族铅盐, 变温透射光谱, Hall 测量, 量子阱激光器, 光学增益,

HgCdTe n-on-p 结, 激光束诱导光电流方法, 串音

字数: 约 45,000

作者: 孙英会

学科: 电子科学与技术

专业: 微电子学与固体电子学

导师: 戴宁 研究员; 张波 副研究员

Abstract

IV-VI lead salts and HgCdTe material are two important narrow gap semiconductors, which are widely used in infrared lasers, infrared detectors, and other photo-electronic devices and thermo-electronic devices. Meanwhile, much attention has been focused on the fundamental issues of these narrow gap semiconductors due to their interesting physical properties. In this thesis, we discuss some issues relating to the IV-VI lead salts material, IV-VI lead salts device physics, and HgCdTe device characterizations.

$\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ is one of the PbSe ternary alloys. The optical and transport properties of $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ thin film were first discussed in this dissertation. Then, the theoretical analyses of optical gain for PbSe/ $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ quantum well lasers were performed in order to establish general design principles for IV-VI QW lasers. In addition to the above-mentioned issues, the other parts of this thesis are related to HgCdTe material. Nowadays, many challenges remain for material growth and device fabrication of HgCdTe. Apart from the improvement of HgCdTe material growth and device fabrication, it is necessary to develop convenient and nondestructive technique to diagnose HgCdTe material and devices. Laser beam induced currents (LBIC) is thus a nondestructive optical testing technique which is very useful for HgCdTe material and devices. In this dissertation, we focused on the LBIC method and its applications in HgCdTe devices. The main results of the whole thesis are as following:

1. The optical and transport properties of $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ thin film grown on $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ substrates were discussed. Temperature-dependent optical transmission of $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ films from liquid nitrogen temperature to room temperature was investigated. The transition energy E_g , damping parameter Γ , and oscillator strength A were determined by fitting the experimental transmission spectra. Using these

parameters, the refractive index n , absorption coefficient α , and Urbach bandtail parameter E_u were then obtained. Temperature dependences of Γ and E_u indicate stronger carrier-phonon interactions in the $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ films. Room temperature reflectivity spectrum (1.25 eV - 4.5 eV) and spectroscopic ellipsometry (1.25 eV - 4.5 eV) of $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ indicated that the incorporation of a small portion of Mn ion does not influence the high-lying states of PbSe significantly. Only PbSe-like Raman peaks were observed in the Raman spectrum of $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ thin film. Temperature-dependent Hall measurement has been used to investigate the transport properties of $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ films. Temperature dependences of carrier concentration, mobility, and resistivity were obtained and analyzed. By means of mobility spectrum analysis (MSA), a small portion of 2 D electrons localized in the surface or interface has been found in the p- $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ thin film.

2. Theoretical calculation of optical gain was performed for IV-VI lead salt $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ quantum well lasers by using an analytic gain expression. The reduced density of states and interband transition matrix elements used in the calculation were derived within the framework of the Kane's like $k \cdot p$ model. Peak optical gain as a function of carrier concentration and radiative current density was calculated. The factors that affect the device performance, such as material parameters, laser structures, and temperature, were analyzed in details.

3. Using LBIC technique, we tested some HgCdTe device structures, such as n-on-p diode arrays and ICP (Inductively Coupled Plasma) etched structures. The characteristic minority carrier diffusion length in p-HgCdTe was extracted by fitting the exponential decay curve of the LBIC signal. Temperature dependent LBIC of HgCdTe n-on-p diode arrays were measured and discussed.

4. Crosstalk of HgCdTe long-wavelength infrared (LWIR) n-on-p diode arrays was measured by using LBIC technique. During experiments, HgCdTe diode arrays with different diode pitches were frontside illuminated by a 632.8 nm He-Ne laser at

liquid nitrogen temperature and room temperature. Experimental results show that crosstalk between the nearest neighboring diodes decreases exponentially as the diode pitch increases, and factors that affect the obtained crosstalk were then presented and analyzed. Crosstalk out of the nominal diode area (optically sensitive area) was also measured and discussed.

Keywords: IV-VI lead salts, temperature dependent transmission spectrum, Hall measurement, Quantum well lasers, Optical gain, HgCdTe n-on-p diode, LBIC, crosstalk

Word number: about 45,000

Author: Ying-hui Sun

Subject: Electron Science and Technology

Major: Microelectronics and Solid state Electronics

Supervisors: Prof. Ning Dai and Prof. Bo Zhang

目录

摘要.....	I
Abstract.....	III
目录.....	i
第一章 引言.....	1
1.1 IV-VI 族铅盐半导体材料简介.....	1
1.1.1 IV-VI 族铅盐的晶体结构.....	1
1.1.2 IV-VI 族铅盐的能带结构.....	2
1.1.3 IV-VI 族铅盐的光学性质.....	3
1.1.4 IV-VI 族铅盐的电学性质.....	5
1.1.5 IV-VI 族铅盐的杂质缺陷.....	7
1.2 IV-VI 族铅盐中远红外激光器研究情况.....	7
1.3 HgCdTe 红外探测器基本背景.....	9
1.4 激光束诱导光电流方法及其在 HgCdTe 光伏器件检测中的应用情况.....	11
1.5 HgCdTe 器件串音测量简介.....	13
1.6 本论文的主要内容.....	15
本章参考文献.....	17
第二章 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的光学和电学性质研究.....	23
2.1 前言.....	23
2.2 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 初步表征.....	23
2.3 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的变温透射光谱研究.....	26
2.3.1 实验方法.....	26
2.3.2 透射光谱的计算.....	27
2.3.3 结果与讨论.....	28
2.3.3.1 禁带宽度、展宽因子、振子强度和背景介电常数的变温特性.....	31
2.3.3.2 折射率、吸收系数以及 Urbach 带尾参数的变温特性.....	34
2.4 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜的反射与椭圆偏光谱.....	37
2.5 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜的拉曼光谱.....	38
2.6 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的变温 Hall 测量.....	39
2.6.1 实验方法.....	39
2.6.2 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜载流子浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况.....	39
2.6.3 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜迁移率谱分析.....	43
2.7 本章小结.....	47
本章参考文献.....	48
第三章 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的增益研究.....	51
3.1 前言.....	51
3.2 激光器原理与光学增益.....	52
3.3 IV-VI 族材料的约化态密度和带间跃迁矩阵元的计算.....	55
3.4 增益计算结果和讨论.....	57
3.4.1 不同生长方向的 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光增益.....	58
3.4.2 不同阱宽的 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器增益.....	60

3.4.3 Sr 组分发生改变时的 PbSe/Pb _{1-x} Sr _x Se 量子阱激光器增益	62
3.4.4 不同温度下 PbSe/Pb _{1-x} Sr _x Se 量子阱激光器增益	64
3.5 本章小结	66
本章参考文献	67
第四章 激光束诱导光电流方法及其在 HgCdTe 光伏器件检测中的应用	71
4.1 前言	71
4.2 激光束诱导光电流方法原理与实验装置	71
4.3 HgCdTe n-on-p 结的 LBIC 信号以及 p-HgCdTe 材料的少子扩散长度的提取	75
4.4 刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构的 LBIC 测量	77
4.5 HgCdTe 光伏器件的变温 LBIC 的初步探索	79
4.5.1 LBIC 随温度发生的峰形变化	79
4.5.2 相邻 n 区间隔很小时的长波 HgCdTe n-on-p 结线列的变温 LBIC 测试	85
4.6 本章小结	88
本章参考文献	89
第五章 基于激光束诱导光电流(LBIC)方法的 HgCdTe 光伏器件串音测量	91
5.1 前言	91
5.2 用于串音测量的 HgCdTe 光伏器件的制备	92
5.3 实验方法	93
5.4 结果与讨论	94
5.4.1 相邻光敏元之间的串音情况	97
5.4.2 光敏元以外区域的串音情况	99
5.5 本章小结	100
本章参考文献	101
第六章 结论和展望	103
6.1 结论	103
6.2 展望	104
附录	105
附录 A IV-VI 族材料约化态密度的计算	105
附录 B 注入的电子浓度 n 和空穴浓度 p 的计算	106
附录 C IV-VI 族材料带边 Bloch 态之间的带间跃迁动量矩阵元的计算	107
附录 D PbSe/Pb _{1-x} Sr _x Se 单量子阱的量子化能级和包络函数的计算	109
攻读博士学位期间发表的论文	111
致谢	113

第一章 引言

窄禁带半导体材料可用于研制红外激光器和红外探测器等。红外激光器在国防上主要用于红外光电对抗和化学武器的探测,在民用方面可以用于多种环境下的大气成分监测等方面。红外探测器则是军用红外系统的核心部件,在导弹的红外成像制导和目标的探测跟踪等方面起着相当重要的作用,并且它还可用于航空航天遥感、资源勘察和气象环境等领域。本文所涉及的两类窄禁带半导体材料分别是目前通常用于制备红外激光器的 IV-VI 族铅盐半导体材料和用于制备红外探测器的碲镉汞 (HgCdTe) 材料。

1.1 IV-VI 族铅盐半导体材料简介

1.1.1 IV-VI 族铅盐的晶体结构

IV-VI 族铅盐半导体主要指元素周期表中 IVA 族同 VIA 族所形成的化合物,比如 PbS、PbSe、PbTe 和 PbSnTe 等。目前,绝大部分关于 IV-VI 族化合物半导体的器件研究均集中在 IV-VI 族铅盐及其合金上。IV-VI 族铅盐的每个原子平均拥有 5 个键合电子,其化学键除共价键外,还有较强的离子键和类金属键成分。^[1] IV-VI 族化合物 PbS、PbSe、PbTe 和 SnTe 等在通常情况下具有 NaCl 结构,IVA 族阳离子和 VIA 族阴离子分别组成一套面心立方结构,如图 1-1 所示。NaCl 结构是一种稳定结构。但在一定条件下(例如温度下降到某个临界温度时)IV-VI 族铅盐可以发生从 NaCl 结构到斜方结构的相变。

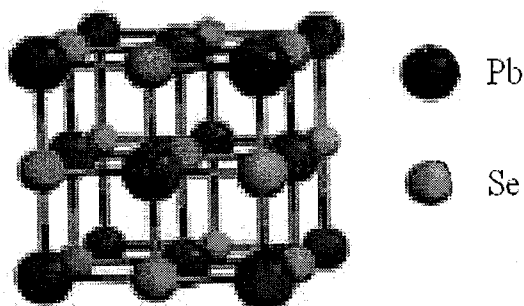


图 1-1 具有 NaCl 结构的 PbSe 晶体结构

1.1.2 IV-VI 族铅盐的能带结构

能带计算表明^[2-5]，IV-VI 族铅盐的导带和价带极值均位于布里渊区 L 点，因此属于具有直接带隙的多能谷半导体材料。图 1-2 给出了经验赝势方法计算得到的 PbSe 的能带结构。^[5] 带隙处，导带波函数为 L_6^- 对称性，价带波函数为 L_6^+ 对称性。高阶临界点跃迁能量 E_1 、 E_2 和 E_3 分别对应 L_{5-7} 、 L_{4-6} 和 Σ_{5-6} ， Σ_{5-7} 和 Δ_{5-6} ， Σ_{4-7} 和 Δ_{4-6} 各高对称点处的跃迁。^[5]

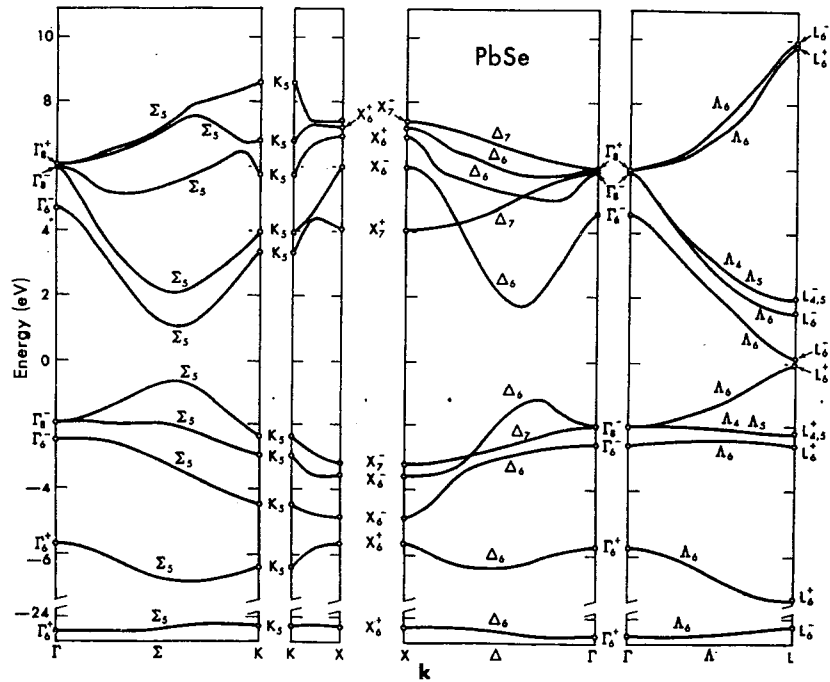


图 1-2 经验赝势方法计算得到的 PbSe 的能带结构^[5]

在带隙附近，IV-VI 族铅盐的等能面为 4 个旋转椭球，如图 1-3 所示。相应地，其有效质量具有各向异性，径向和横向有效质量分别表示为 m_i^* 和 m_t^* 。IV-VI 族铅盐具有较小的电子和空穴有效质量。如果不考虑远带的影响，导带和价带可以近似认为是对称的。表 1-1 列举了 PbS、PbSe 和 PbTe 在 0 K 时的有效质量和带隙。^[6] PbSe 和 PbTe 的带隙和有效质量均随着温度升高而不断增加。^[7] 因为铅盐半导体缺少重空穴带，所以相比于 III-V 和 II-VI 的窄禁带半导体材料，它们具有较小的 Auger 复合率。^[8] 由于禁带宽度小，IV-VI 族铅盐半导体的能带呈现非抛物线性。Kane's 模型 $k \cdot p$ 微扰方法是研究 IV-VI 族铅盐带边光学性质的一种重要方法。^[2, 3, 6, 9, 10] 利用这种方法可以精确求解 IV-VI 族

铅盐带边色散关系。

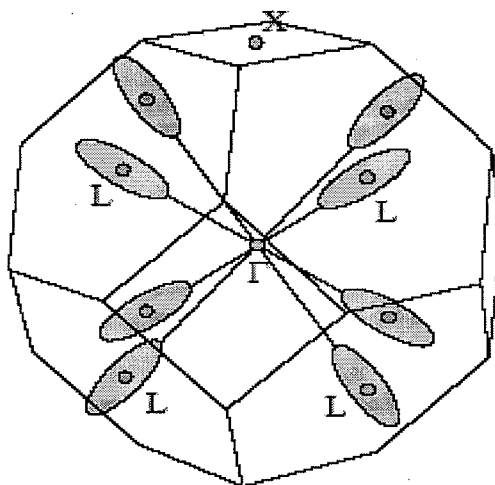


图 1-3 IV-VI 族铅盐半导体带隙附近等能面示意图

表 1-1 PbS、PbSe 和 PbTe 在 0 K 时的电子和空穴的有效质量和带隙^[6]

	PbTe	PbSe	PbS
m_l^e	0.240	0.070	0.105
m_t^e	0.024	0.040	0.080
m_l^h	0.310	0.068	0.105
m_t^h	0.022	0.034	0.075
$E_g(\text{eV})$	0.19	0.15	0.29

1.1.3 IV-VI 族铅盐的光学性质

IV-VI 族铅盐半导体属于高折射率材料。例如，77 K 时 PbSe 和 PbTe 材料在带隙附近的折射率均大于 5，^[11] 这将有利于在此类材料中实现量子限域。随着温度的升高，IV-VI 族铅盐半导体的折射率不断下降。通过调节 IV-VI 铅盐三元或四元合金组分，IV-VI 族铅盐半导体的带隙对应的光子波长可以在 3 - 30 μm 范围内变化，^[12] 图 1-4 给出了几种重要的 IV-VI 族铅盐半导体材料 77 K 时的带隙、折射率和晶格常数情况。^[7] 随着温度升高，IV-VI 族铅盐半导体的带隙不断增加。图 1-5 给出了 PbS、PbSe 和 PbTe 带隙附近折射率随温度的变化情况。^[11] 从图中可以看出，随着温度升高，折射率不断下降，这种下降会

导致材料中的自由载流子吸收增加,降低 IV-VI 族铅盐光电器件的性能。图 1-6 给出了 PbSe 在 0 eV-6 eV 之间的反射光谱^[13],其中 E_2 跃迁具有最高的反射率。

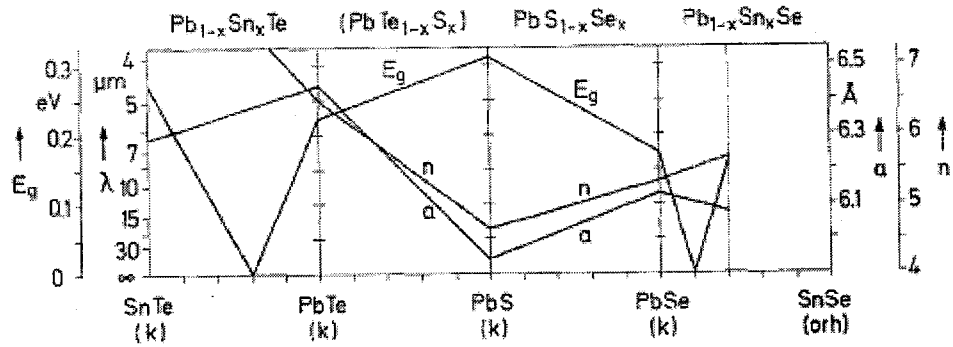


图 1-4 几种重要 IV-VI 族铅盐半导体材料 77 K 时的带隙、折射率和晶格常数^[13]

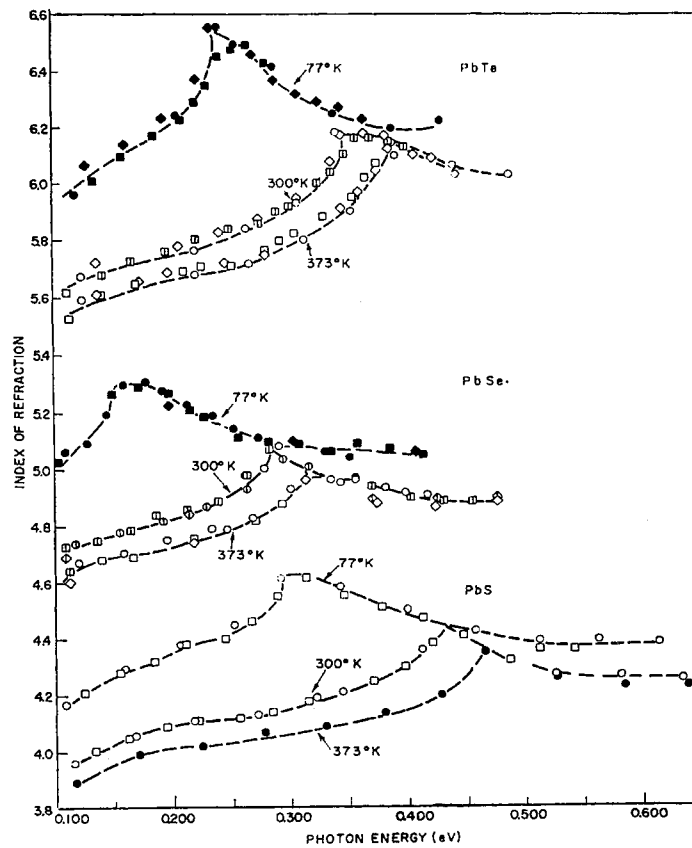


图 1-5 PbS、PbSe 和 PbTe 带隙附近折射率随温度的变化情况^[11]

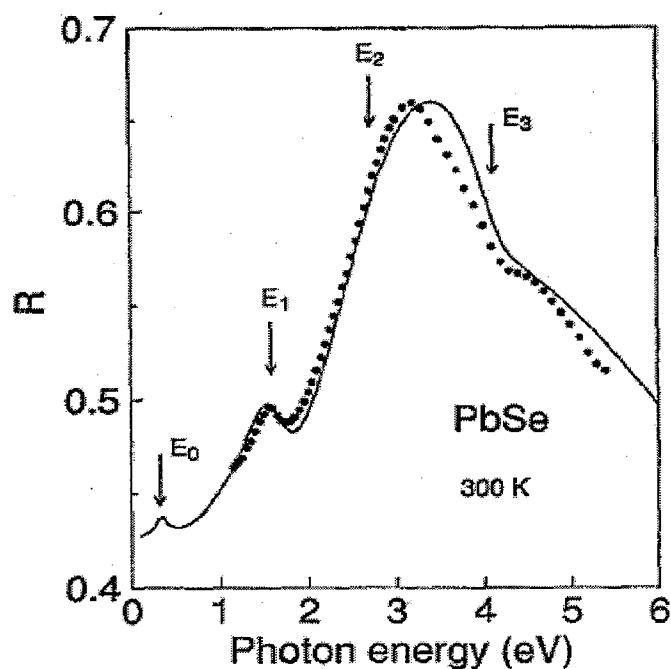


图 1-6 PbSe 在 0 eV-6 eV 之间的反射光谱^[13]

1.1.4 IV-VI 族铅盐的电学性质

IV-VI 族铅盐的每个原子平均拥有 5 个键合电子，与 V 族单质类似。因此，IV-VI 族铅盐的电阻在通常情况下随温度上升而升高，类似金属的特性。图 1-7 给出了几个 IV-VI 族铅盐样品的电阻率随温度的变化情况。^[14] IV-VI 族铅盐半导体的静态介电常数很大，例如，PbTe 在 300 K 时的静态介电常数约为 400，而在 77 K 时其静态介电常数可达到 1000。较大的静态介电常数使带电杂质能够得到有效屏蔽，降低离化杂质对载流子的散射；同样因为介电常数大，浅施主和浅受主上的载流子离化能很小，因此在低温下不容易发生载流子的“冻出”。正是这种屏蔽作用，使得 IV-VI 族材料在通常情况下具有较高的低温迁移率；并且使得这类材料对于晶体生长和器件加工过程中引入的缺陷或和杂质不敏感，从而易于制备高质量的材料和器件。表 1-2 列举了几种 IV-VI 族铅盐材料 PbS、PbSe 和 PbTe 的迁移率和载流子浓度情况。^[14] 从中可以看出，即使是 p 型材料，低温时 IV-VI 族铅盐的迁移率都非常高。

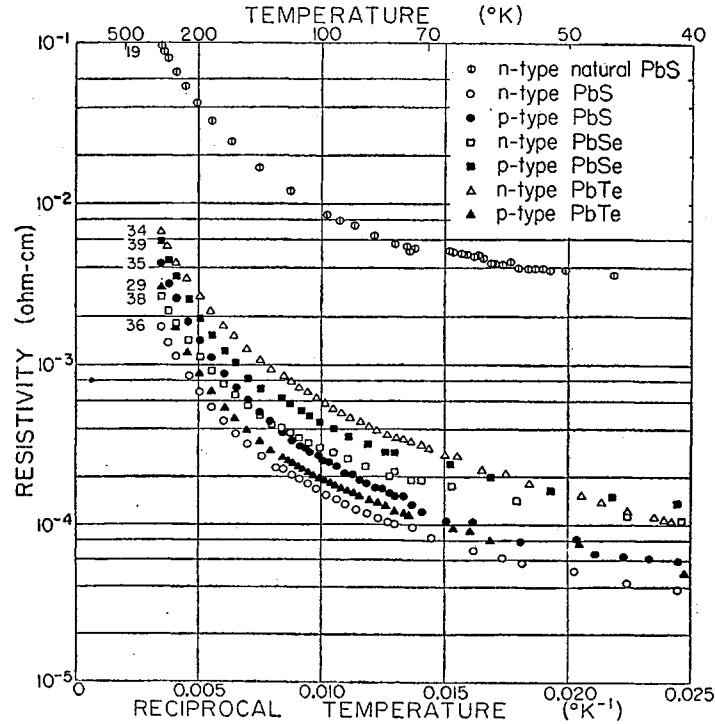


图 1-7 几种重要 IV-VI 族铅盐的电阻率随温度变化情况 [14]

表 1-2 PbS、PbSe 和 PbTe 的迁移率和载流子浓度 [14]

Sample Type and material	No.	Carrier concentration (cm ⁻³)	Hall mobility (cm ² /volt-sec)			Average slope of mobility curve between 295°K and 100°K
			295°K	77.4°K	4.2°K	
n PbS (natural)	3	0.164 × 10 ¹⁸	431	6040	14 400	2.1
	19	0.184	386	6030	15 400	2.2
	20	0.191	490			
	4	0.306	462			
	5	1.14	402			
n PbS	13	3.74	614			
	17	4.25	515	11 000	68 500	2.3
	26	4.63	572	8750	40 200	2.1
	36	7.45	523	8520	55 600	2.2
	16	27.2	500	4160	26 800	1.6
p PbS	41	2.27	594			
	35	2.66	621	15 000	80 000	2.4
n PbSe	38	2.38	1045	12 700	38 200	2.0
	27	3.57	1000	16 500	139 000	2.3
p PbSe	39	1.44	865	15 800	48 100	2.3
	24	3.72	920	12 800	44 100	2.1
	37	4.28	995	13 700	57 900	2.1
n PbTe	34	0.579	1450	27 700	450 000	2.2
	9	1.08	1730	31 600	800 000	2.2
	32	3.11	1670	21 000	231 000	
	33	3.22	1640	20 800	123 000	
	30	9.48	1340	10 700	66 500	1.6
p PbTe	1	0.332	839	20 100		
	1a	0.932	763	21 600		
	12	2.39	686	16 200		
	8	2.12	780	16 200	256 000	2.4
	11	2.24	784			
	10	2.28	695			
	29	3.02	724	14 600	192 000	2.3

1.1.5 IV-VI 族铅盐的杂质缺陷

材料中的杂质和缺陷可以改变晶体的完整性,从而使得材料的物理性质发生改变。了解和控制材料中的杂质和缺陷有助于对材料进行改性。从掺杂原子的来源角度来分, IV-VI 族材料中的杂质缺陷有如下两种: 偏离化学配比的本征缺陷和化学掺杂。

偏离化学配比的本征缺陷是指材料中并没有引入新元素,只是原有材料中各种元素的化学配比发生改变。一般来说,当 IV-VI 族铅盐中含有过量金属时将产生施主能级,含有过量非金属元素时将产生受主能级。过量金属元素导致的晶格点缺陷被看作是非金属元素的空位或金属填隙原子。反之亦然。对于偏离化学配比的本征缺陷,其对应的热和磁的载流子冻出现象不容易探测到。^[15] 如果从杂质缺陷的类氢模型来看:由于 IV-VI 族化合物的介电函数很大,使得类氢施主或受主的离化能很小,因此在普通实验条件下很难分辨。但是对于 IV-VI 族化合物,由空位或填隙原子造成的非本征载流子不能采用通常的带隙中施主受主模型来解释。利用格林函数方法计算 PbTe 空位能级的结果表明:空位势能与类氢模型显著不同。^[16,17] Pb 或 Te 的空位不能在带隙中引入局域能级,只能在价带或导带中出现能级改变。对于引入其他元素的化学掺杂方式,参考文献[18]中总结了多种元素在 IV-VI 族化合物的掺杂情况的实验结果。最近的一个工作则是采用第一性原理的方法计算了 PbTe 中的多种杂质缺陷的行为。^[19] 计算结果表明,掺杂原子除了可能在带隙中引入局域能级外,还对材料带隙附近的态密度产生显著影响。

1.2 IV-VI 族铅盐中远红外激光器研究情况

IV-VI 族铅盐的重要应用是制备中远红外激光器。目前,商用中、远红外激光二极管几乎均是由 IV-VI 族铅盐材料制作而成。这些红外激光器主要应用在痕量气体检测方面。如大气污染检测、生产线上的过程控制、医疗诊断,矿井气体监测等。同时在无线电通信、爆炸探测、测距等方面也有着潜在应用。图 1-8 给出了几种商用 IV-VI 族铅盐双异质结和同质结激光器的工作波长范围和一些气体特征吸收能量。目前,基于带间光跃迁的双极型 pn 结中红外半导

体量子阱激光器材料和器件主要包括: InP 基应变补偿 InGaAs/InGaAsP 体系, 理论预计波长覆盖范围为 $1.7 - 2.3 \mu\text{m}$; ^[20] GaSb 基 GaInAsSb/AlGaAsSb 体系, 理论预计波长覆盖范围为 $1.7 - 5.0 \mu\text{m}$; ^[21] IV-VI 族铅盐体系理论预计波长覆盖范围为 $2.6 - 30 \mu\text{m}$ 。另外, 还有基于导带电子在导带内子带间跃迁的量子级联激光器 (quantum cascade lasers, QCL) ^[22] 和带间级联激光器 (interband cascade laser, ICL) ^[23]。IV-VI 族铅盐材料制备的中、远红外激光二极管具有非常窄的激光线宽、易于调谐、易于制备等优点, 因此是中、远红外激光器的重要材料。

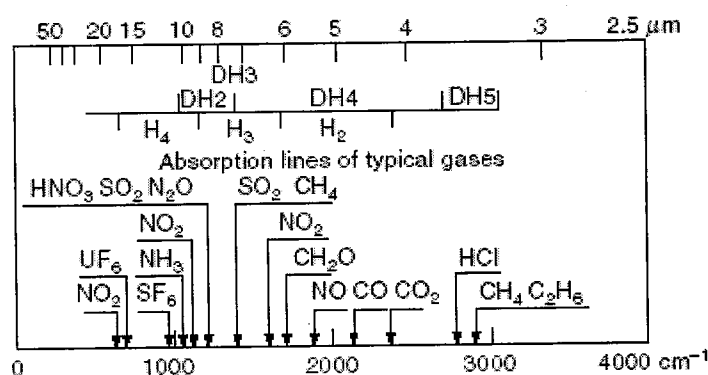


图 1-8 商用 IV-VI 族铅盐双异质结和同质结激光器的工作波长范围和
 围和一些气体特征吸收能量. DH2 和 H4 为 PbSnSe; DH3 为 PbSe;
 DH4、DH5 和 H2 为 PbEuSe

IV-VI 族铅盐激光器发展到现在已经有几十年的历程。J. O. Dimmock 等在 1966 年报道了 $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$ 的激光发射。^[24] 1988 年, 由 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 制备的双异质结 (DH) 二极管中红外激光器已经实现最高工作温度在 169 K 的连续波工作模式和最高工作温度在 290 K 的脉冲工作模式^[25]。至今, IV-VI 铅盐半导体已经发展出了同质结构、双异质结构、量子阱结构、单模分布反馈结构和垂直腔面发射结构 (vertical-cavity surface-emitting-lasers, VCSEL) 的激光器。IV-VI 族铅盐半导体中远红外激光器的研究方向是 VCSEL 和提高连续工作温度和功率。2000 年, 首次研制出 IV-VI 族铅盐垂直腔表面发射激光器 (VCSELs) 实现了激射波长在 $4.5 - 6 \mu\text{m}$ 附近的发射。^[26] 2001 年, W. Heiss 等研制出 PbTe 量子阱垂直腔表面发射激光器 (VCSELs) 实现了激射波长在 $3.1 \mu\text{m}$ 附近的温度为 65°C 的脉冲发射。^[27] 2002 年, 铅盐 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 多量子阱垂直腔表面发射激光器 (VCSELs) 实现了激射波长在 $4 \mu\text{m}$ 附近的室温脉冲发射。^[28] 2003 年,

铅盐 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 多量子阱垂直腔表面发射激光器 (VCSELs) 实现了激光波长在 $4\ \mu\text{m}$ 附近最高工作温度为 $230\ \text{K}$ 的连续波工作模式。^[29] 图 1-9 是一种 IV-VI 族铅盐垂直腔表面发射激光器基本结构示意图。^[30]

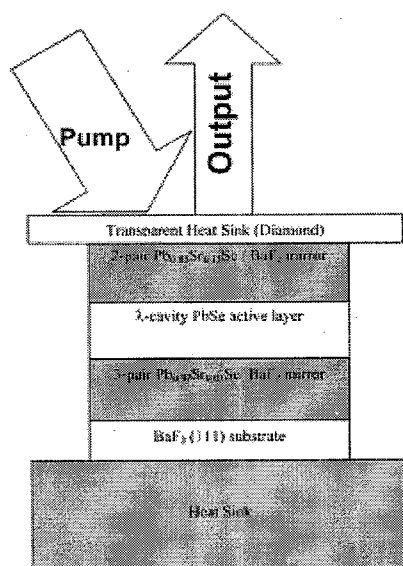


图 1-9 一种 IV-VI 族铅盐垂直腔表面发射激光器基本结构示意图^[30]

IV-VI 族铅盐材料材料有很高的联合态密度、较小的 Auger 复合率以及较高的介电常数，这些特点是这类材料作为激光材料的优点。但是，IV-VI 族铅盐材料和器件中还存在一些关键问题：例如，随着波长的增加，伴随着自由载流子吸收的增加使内损耗迅速增加，导致材料的折射率急剧减小；材料的热导性差也制约着基于 IV-VI 族铅盐的光电器件的性能。因此，人们在 IV-VI 族铅盐激光器性能方面也开展了一些研究工作。Z. Shi 等对 IV-VI 族铅盐垂直腔表面发射激光器 (VCSELs) 的输出功率进行了理论计算，计算结果表明，材料的热导差是影响激光器室温工作的重要因素。^[30] M. F. Khodr 等对 IV-VI 族铅盐量子阱激光器的能带非抛物线性对增益的影响进行了讨论。^[31] 国内也开展了对 IV-VI 族铅盐激光器增益的理论计算工作。^[32] 需要指出的是，相比于其他类型的激光器，IV-VI 族铅盐激光器性能的实验和理论研究工作开展得还不够充分。

1.3 HgCdTe 红外探测器基本背景

HgCdTe 材料是由 CdTe 和 HgTe 材料形成的三元混晶。CdTe 和 HgTe 材料

的晶格常数非常接近, 分别为 $6.46 \text{ \AA}$ 和 $6.48 \text{ \AA}$, 并且都具有闪锌矿结构, 这两种材料以任意配比可以形成 HgCdTe 材料. HgCdTe 材料的直接带隙位于布里渊区的 Γ 点, 其带隙的变化范围可以从 0 eV 到 1.6 eV . HgCdTe 材料用于制备红外探测器具有如下优点: HgCdTe 对红外光的探测是本征激发, 具有较高的吸收系数和量子效率; 通过调节 HgCdTe 中 CdTe 和 HgTe 两个材料的比例, 其带隙的变化范围可以涵盖三个大气透过窗口: $1 \sim 3 \mu\text{m}$ 的短波红外 (SWIR)、 $3 \sim 5 \mu\text{m}$ 的中波红外 (MWIR) 和 $8 \sim 14 \mu\text{m}$ 的长波红外 (LWIR); 相比于 PbS 等材料, HgCdTe 具有介电常数小, 电子迁移率高等优点。

最初的红外探测器为热敏型探测器。整个 19 世纪以及 20 世纪上半叶, 出现了多种类型的热敏型红外探测器。这类探测器的响应时间较长, 结构脆弱, 不适于野外使用。20 世纪 30 年代出现了 PbS 光电型红外探测器。其后, 伴随着半导体科学与技术的迅速发展, 产生了多种类型的光电型红外探测器。下面表格^[33]给出了常用的几种光电型红外探测器。HgCdTe 材料是 LAWSON W D^[34]于 1959 年提出的。目前, HgCdTe 探测器及其焦平面阵列器件是应用最广泛的红外探测器。^[35] HgCdTe 红外探测器可以制成光伏型和光导型。光导型器件结构简单, 但功耗大, 响应慢; 相比于光导型, 光伏型器件功耗小, 响应快, 并且易于制备成焦平面阵列。第三代 HgCdTe 红外焦平面技术的主要目标就是实现大规模集成的多色探测。^[36] HgCdTe 红外焦平面阵列是新一代武器系统的核心部件之一, 已经被广泛应用在监视、识别、跟踪、制导、光电对抗、遥感等各个领域。它不用光机扫描而直接凝视成像。与传统单元红外探测器相比, 红外焦平面阵列具有灵敏度高、视场大、空间分辨力高、探测识别距离远等优点。

表 1-3 对应三个大气透过窗口的常用分立式光子探测器

光谱响应范围	$1 \sim 3 \mu\text{m}$	$3 \sim 5 \mu\text{m}$	$8 \sim 14 \mu\text{m}$
光导型探测器	PbS,	PbSe, InSb, HgCdTe	HgCdTe, Ge Hg, Si X
光伏型探测器	HgCdTe, InGaAs/GaAlAs	InSb, HgCdTe	HgCdTe

目前, 用于 HgCdTe 光伏器件制备的材料多为分子束外延方法生长。在 HgCdTe 晶体制备方面面临着重要的挑战: 首先是材料的结构完整性差。由于 Hg 元素在材料中比较活跃, 使得材料中易于出现 Hg 空位, 游离的 Hg 原子以及这些点缺陷与其他杂质形成的复合缺陷。另外材料中还比较容易出现位错, 小角度晶界等。以上这些不利因素使得 HgCdTe 材料的电学、光学、机械性以及稳定性能大打折扣。再者, HgCdTe 材料作为一种合金化合物窄禁带半导体材料, 其合金组分的均匀性差, 这直接影响到探测器的均匀性。因此, 相比于 Si 和 GaAs 等材料制备和器件工艺都比较成熟的半导体材料, HgCdTe 材料需要在材料生长和器件制备上花大力气进行改进。所以, 在进一步改进材料生长和器件制备工艺的同时, 开展对 HgCdTe 材料和器件的方便和无损的质量检测成为必要。

1.4 激光束诱导光电流方法及其在 HgCdTe 光伏器件检测中的应用情况

激光束诱导光电流 (laser-beam-induced currents, LBIC)^[97] 方法具有无损伤、高分辨、实施简单的特点, 是一种适合 HgCdTe 材料和器件的质量诊断技术。在利用 LBIC 方法测量样品的 LBIC 信号时, 一般在被测样品的两端制备两个欧姆电极。然后将低功率的激光束照射到样品上。受到激光激发的样品产生电子空穴对, 电子空穴对在局域电场的作用下发生定向移动就形成了光电流。随着激光斑在样品表面的扫描, 就得到了光电流随激光束位置的函数关系, 即 LBIC 信号。局域电场可能是材料中的杂质、应力、沉淀、夹心和双晶界等, 也可以是器件工艺过程中形成的各种结, 如 pn 结、nm⁺ 结等。LBIC 电流方向取决于激光束同局域电场以及电极的相对位置。激光扫描到样品中的电活性区域时, LBIC 信号显示双模式行为, 即每个电活性区域的两个 LBIC 线扫描边界分别对应 LBIC 信号的正负峰, 其正负与收集电极有关。图1-10 是 LBIC 信号产生的原理和典型的 pn 结的 LBIC 信号双模式行为。

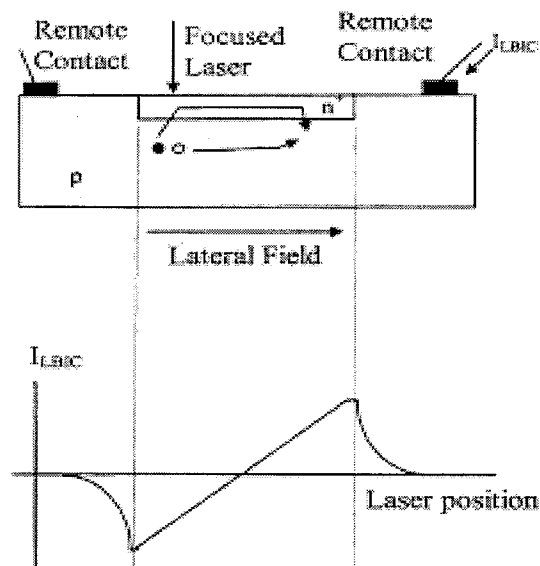


图1-10 pn结的LBIC信号产生原理和LBIC信号双模式行为^[38]

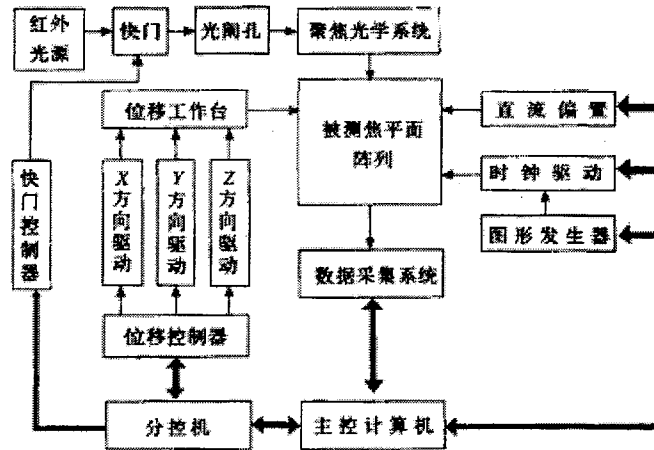
Wallmark^[39]最早发表了关于LBIC的文章,他认为LBIC信号源于非均匀光激发的pn结的横向光伏效应。到上世纪八十年代末期,J.Bajaj等^[40]将其发展成为一种定性研究HgCdTe材料和器件的实验方法。LBIC方法除了应用在HgCdTe材料的电活性区域的检测,它还广泛应用于HgCdTe光伏器件检测。比如,可以从LBIC信号中提取平面结的结深,^[41]和结区外少子的扩散长度^[42]。零偏压电阻和器件面积的乘积 R_0A 是衡量探测器性能的重要指标,在一定条件下,LBIC测量也是获得pn结 R_0A 的方法之一。^[43]J.F.Silicini等利用LBIC方法结合理论模拟来确定反应离子刻蚀(reactive ion etching, RIE)形成的HgCdTe材料pn结n区的掺杂浓度。^[44]另外,还可以利用LBIC技术检测器件工艺过程中所导致的光敏元面积扩大的现象。^[45]影响LBIC信号的因素众多,比如材料的带隙,载流子扩散长度,激发光波长,电活性区域的几何尺寸等。要想从如此众多的因素中提取有用的信息往往需要固定一些影响因素。D.A.Redfern报道了低温时HgCdTe材料pn结的LBIC信号的峰值趋于饱和的现象。^[46]他们的计算表明,LBIC的峰值达到饱和时,峰值的大小将不再与材料的掺杂浓度和载流子的扩散长度等有关,这样就便于利用LBIC的最大值的饱和情况来研究pn结的几何尺寸,电极位置等其他影响因素。LBIC技术还被用

来研究 HgCdTe 光伏器件光敏元之间的串音。C. A. Musca 等对 HgCdTe 中波红外 (MWIR) 的平面工艺器件和长波红外 (LWIR) mesa 隔离的器件进行了串音测量。^[47] L. Karp 等也曾对 MWIR HgCdTe 器件进行了串音研究。^[48] 目前, LBIC 技术的研究主要集中在西澳大利亚大学 (University of Western Australia) 和中科院上海技术物理研究所等单位。

1.5 HgCdTe 器件串音测量简介

在红外焦平面阵列中, 相邻像元之间的串音 (crosstalk) 定义为: 当某像元被红外光照射时, 相邻像元接收到的信号与本像元接收到的信号之比。串音是 HgCdTe 红外焦平面阵列的众多特性参数中的一个重要的参数。美国军方将其列为红外焦平面阵列性能评价时的必测参数。在焦平面阵列成像系统中, 串音的出现将降低系统的调制传递函数 (MTF), 导致整个系统的性能下降。为了进一步提高红外成像的空间分辨率, HgCdTe 红外焦平面阵列中光敏元的尺寸和间距不断减小。这将进一步加剧焦平面阵列中的串音。

HgCdTe 红外焦平面阵列的串音测量平台是一个复杂的系统。图1-11给出了一种红外焦平面阵列串音测试系统原理框图。^[49] 测量串音时, 红外光源发出的红外辐射通过光阑孔后进入聚焦光学系统, 得到直径很小的红外小光点。同时, 给被测 HgCdTe 焦平面阵列施加合适的直流偏压和时钟驱动脉冲, 使其工作于最佳工作状态。移动工件台, 将被测焦平面阵列的像元平面调整到聚焦光学系统的焦面上, 并将红外小光点对准某个像元的中心。数据采集系统采集当前光点照射像元及其周围像元的响应信号, 最后算出串音。光阑孔之前的快门用于背景信号的测试。整个测试过程由计算机自动控制。

图1-11 红外焦平面阵列串音测试系统原理框图^[49]

串音测量系统的一个关键技术是得到直径较小的红外小光点。由于衍射极限的存在，通常的光学系统在会聚红外光方面有一定的技术难度。因此，可见或近红外的激光被尝试用来作为测量HgCdTe多元器件串音的辐射源。^[47, 48] 由于激光束诱导光电流（LBIC）测量平台既具有直径较小的激光光斑又具有可移动平台，所以是测量 HgCdTe 多元器件串音的一种简便的替代方法。图1-12是利用LBIC方法测量HgCdTe多元器件串音的测量配置。^[47] 图1-12中采用的是激光背入射方式。测量时，光敏元2（Diode 2）的 p 区和 n 区连接电流表来收集电信号，而相邻两个光敏元各自的 p 区和 n 区短路。将 LBIC 测量系统中的激光聚焦到HgCdTe 多元器件的衬底与 n 区交界处。然后使激光光斑依次扫描经过图中3个光敏元，从而得到如图1-13 所示的响应曲线。相邻光敏元与中间光敏元之间的串音的计算方法是：将图1-13 所示响应曲线的 $-a/2$ 到 $a/2$ 之间的部分作为 Diode 2 接收到的光信号，将 $-a/2$ 到器件左边边界之间的部分作为 Diode1 接收到的信号。然后用后者除以前者即作为 Diode1与 Diode2 之间的串音。虽然利用LBIC方法得到的串音并不是器件实际工作时的串音，但其与器件实际工作时的串音之间存在着对应关系。由于LBIC测量方法简便易行，因此是测量 HgCdTe 多元器件串音的有益选择。

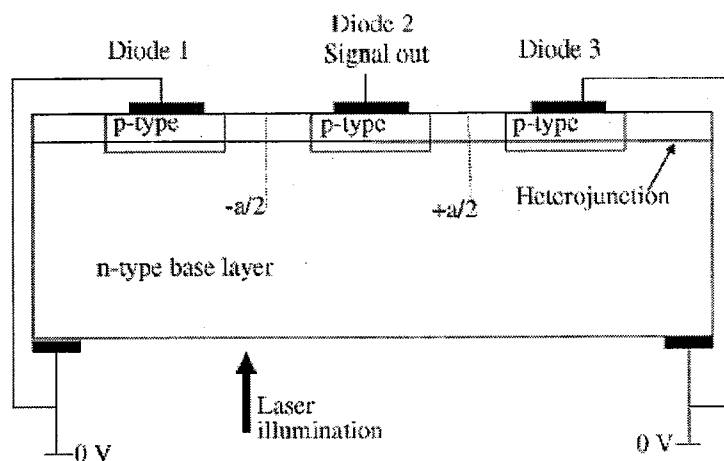


图1-12 利用LBIC方法测量HgCdTe多元器件的串音 [47]

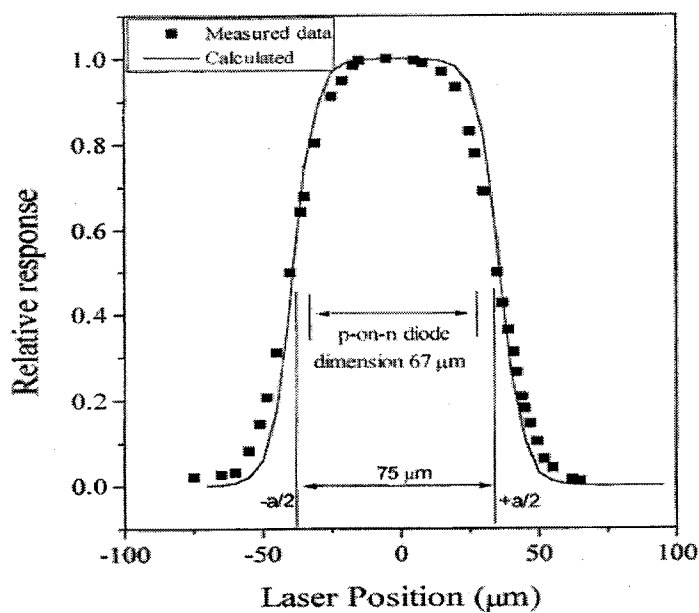


图1-13 利用LBIC方法测量HgCdTe多元器件串音所得到的光响应曲线 [47]

1.6 本论文的主要内容

本文主要进行了以下几方面的研究：

1. $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 是 PbSe 材料的一种重要三元合金。第二章对在 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底上生长的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料进行了光学和电学的表征和分析。其中重点介绍 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料中红外波段的变温透射光谱和变温 Hall 测量。

2. IV-VI 铅盐半导体在中红外半导体激光器方面有着广泛的应用。第三章对 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的增益性质进行了理论计算。得到了量子阱增益随阱结构参数以及温度等因素的变化情况。

3. 第四章首先介绍激光束诱导光电流方法和实验装置, 然后给出了对一些 HgCdTe 器件结构的测试结果并进行了一些定性分析。

4. 第五章中, 利用扫描激光显微镜对 HgCdTe 长波红外 n-on-p 结线列的串音进行了测量和分析。在测量过程中, 尝试采用 632.8 nm He-Ne 激光正入射器件表面来测量串音。对影响实验结果的因素进行了讨论。

本章参考文献

- [1] G. Lucovsky, R. M. White, Effects of Resonance Bonding on the Properties of Crystalline and Amorphous Semiconductors, *Phys. Rev. B* 8 (1973) 660.
- [2] John O. Dimmock and George B. Wright, Band Edge Structure of PbS, PbSe, and PbTe, *Phys. Rev.* 135 (1964)821.
- [3] D. L. Mitchell and R. F. Wallis, Theoretical Energy-Band Parameters for the Lead Salts, *Phys. Rev.* 151 (1966) 581.
- [4] G. Martinez, M. Schlüter, and Marvin L. Cohen, Electronic structure of PbSe and PbTe. I. Band structures, densities of states, and effective masses, *Phys. Rev. B* 11 (1975) 651.
- [5] S. E. Kohn, P. Y. Yu , Y. Petroff , Y. R. Shen, Y. Tsang, and M. L. Cohen, Electronic Band Structure and Optical Properties of PbTe, PbSe, and PbSe, *Phys. Rev. B* 8 (1973) 1477.
- [6] E. A. de Andrada e Silva, Optical transition energies for lead-salt semiconductor quantum wells, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 8859.
- [7] H. Preier, Recent advances in lead-chalcogenide diode lasers, *Appl. Phys.* 20 (1979) 189.
- [8] Huizhen Wu, Ning Dai, and Patrick J. McCann, Experimental determination of deformation potentials and band nonparabolicity parameters for PbSe, *Phys. Rev. B* 66 (2002) 045303.
- [9] S. Yuan, H. Krenn, G. Springholz, G. Bauer, Dispersion of absorption and refractive index of PbTe and $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ ($x < 0.05$) below and above the fundamental gap, *Phys. Rev. B* 47 (1993) 7213.
- [10] H. Krenn, S. Yuan, N. Frank, G. Bauer, Influence of nonparabolic-energy-band dispersion on the optical constants close to the fundamental absorption in PbSe and $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ epitaxial films, *Phys. Rev. B* 57 (1998) 2393.
- [11] J. N. Zemel, J. D. Jensen, and R. B. Schoolar, Electrical and optical properties

- of epitaxial films of PbS, PbSe, PbTe, and SnTe, Phys. Rev. 140 (1965) A330.
- [12] D. L. Partin, IEEE J. Quantum Electronics, Lead Salt Quantum Effect Structures, 24 (1988) 1716.
- [13] N. Suzuki, K. Sawai, S. Adachi, Optical properties of PbSe, J. Appl. Phys. 77 (1995) 1249.
- [14] R. S. Allgaier and W. W. Scanlon, Mobility of Electrons and Holes in PbS, PbSe, and PbTe between Room Temperature and 4.2°K, Phys. Rev. 111(1958)1029 .
- [15] G. Bauer and H. Burkhard, H. Heinrich and A. Lopez-Otero, Impurity and vacancy states in PbTe, J. Appl. Phys. 47 (1976) 1721.
- [16] Nelson J. Parada and George W. Pratt, Jr., New Model for Vacancy States in PbTe, Phys. Rev. Lett. 22 (1969) 180.
- [17] Nelson J. Parada, Localized Defects in PbTe, Phys. Rev. B. 3(1971) 2042.
- [18] G. Nimtz, B. Schlicht, Narrow-Gap Lead Salts, springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, (1983) p21.
- [19] Salameh Ahmad, S. D. Mahanti, Khang Hoang, and M. G. Kanatzidis, *Ab initio* studies of the electronic structure of defects in PbTe, Phys. Rev. B. 74 (2006) 155205.
- [20] S Forouhar, A Ksendzov, A Larsson, and H Temkin, InGaAs/InGaAsP/InP strained-layer quantum well lasers at approximately 2 μm , Electronics Letters, 28 (1991) 1431.
- [21] G. W. Turner, H. K. Choi, and M. J. Manfra, Ultralow-threshold (50 A/cm²) strained single-quantum-well GaInAsSb/AlGaAsSb lasers emitting at 2.05 μm , Appl. Phys. Lett. 72 (1998) 876.
- [22] J Faist, F Capasso, DL Sivco, and C Sirtori, Quantum cascade laser Science, 264 (1994) 553.
- [23] Rui Q. Yang, Chih-Hsiang Lin, S. J. Murry, S. S. Pei, H. C. Liu, M. Buchanan, and Emmanuel Dupont, Interband cascade light emitting diodes in the 5–8 μm spectrum region, Appl. Phys. Lett. 70 (1997) 2013.
- [24] J. O. Dimmock, I. Melngailis, and A. J. Strauss, Band Structure and Laser

- Action in $\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$, Phys. Rev. Lett. 16 (1996) 1193.
- [25] B. Spanger, U. Schiessl, A. Lambrecht, H. Böttner, and M. Tacke, Near-room-temperature operation of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ infrared diode lasers using molecular beam epitaxy growth techniques, Appl. Phys. Lett. 53 (1998) 2582 .
- [26] T. Schwarzl, W. Heiss, G. Springholz, M. Aigle, and H. Pascher, 6 μm vertical cavity surface emitting laser based on IV-VI semiconductor compounds, Electron. Lett. 36 (2000) 322.
- W. W. Bewley, C. L. Felix, I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and Z. Shi, Lead-salt vertical-cavity surface-emitting lasers operating at $\lambda = 4.5\text{--}4.6\ \mu\text{m}$ with optical pumping, Electron. Lett. 36 (2000) 539.
- [27] W. Heiss, T. Schwarzl, and G. Springholz, K. Biermann, and K. Reimann, Above-room-temperature mid-infrared lasing from vertical-cavity surface-emitting PbTe quantum-well lasers, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 862.
- [28] F. Zhao, H. Wu, L. Jayasinghe, and Z. Shi, Above-room-temperature optically pumped 4.12 μm midinfrared vertical-cavity surface-emitting lasers, Appl. Phys. Lett. 80 (2002) 1129.
- [29] F. Zhao, H. Wu, A. Majumdar, and Z. Shi, Continuous wave optically pumped lead-salt mid-infrared quantum-well vertical-cavity surface-emitting lasers, Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 5133.
- [30] S. Khosravani and Z. Shi, Theoretical investigation of high temperature IV-VI compound continuous wave midinfrared vertical cavity surface emitting lasers, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 139.
- [31] M. F. Khodr and P. J. McCann, B. A. Mason, Gain and current-density calculation in IV-VI quantum well lasers, J. Appl. Phys. 77 (1995) 4927.
- [32] 徐天宁,李家辉,张磊,吴惠桢, PbTe /CdTe 量子阱光学性质的研究, 光学学报 28 (2008) 1565.
- [33] 袁继俊, 红外探测器发展述评, 激光与红外 36 (2006) 1099.
- [34] LAWSON W D, NIELSEN S, PUTLEY E H, et al. Preparation and properties of HgTe and mixed crystals of HgTe-CdTe, J Phys Chem Solids 9 (1959) 325.

- [35] 褚君浩,窄禁带半导体物理学,北京:科学出版社, (2005): p5.
- [36] 何力,胡晓宁,丁瑞军,李言谨,杨建荣,张勤耀,第三代红外焦平面基础技术的研究进展,红外与激光工程 5(2005)679.
- [37] J.Bajaj, W.E.Tennant, R.zucca, and S.J.C Irvine, Spatially resolved characterization of HgCdTe materials and devices by scanning laser microscopy, Semiconductor Science & Technology 8 (1993) 887.
- [38] C.A. Musca, D.A. Redfern, J.M. Dell,etc, Laser beam induced current as a tool for HgCdTe photodiode characterization, Microelectronics Journal 31 (2000) 537.
- [39] J.T. Wallmark, A New semiconductor photocell using lateral photoeffect, Proceedings of the IRE, (1956) 474.
- [40] J. Bajaj, L.O. Bubulac, P.R. Newman, W.E. Tennant, and P.M. Raccah, Spatial mapping of electrically active defects in HgCdTe using laser beam induced current, J. Vac. Sci. Technol. A 5 (1987) 3186.
- [41] C. A. Musca, D.A. Redfern, E.P.G.Smith, J. M. Dell, L. Faraone, and J. Bajaj, Junction depth measurement in HgCdTe using laser beam induced current (LBIC), Journal of Electronic Materials 28 (1999) 603.
- [42] D.A. Redfern, J.A.Thomas, C. A. Musca, J. M. Dell, and L. Faraone, Diffusion length measurements in p-HgCdTe using laser beam induced current, Journal of Electronic Materials 30 (2001) 696.
- [43] D.A. Redfern, C. A. Musca, J. M. Dell, and L. Faraone, Correlation of laser-beam-induced current with current-voltage measurements in HgCdTe photodiodes, Journal of Electronic Materials 33 (2003) 560.
- [44] J.F. Siliquini, J.M. Dell, C.A. Musca, and L. Faraone, Characterisation of reactive-ion-etching-induced type-conversion in p-HgCdTe using scanning laser microscopy, J. Cryst. Growth 184 (1998) 1219.
- [45] 贾嘉,陈贵宾,龚海梅,李向阳,室温短波碲镉汞结区的 LBIC 方法研究,红外与毫米波学报 24 (2005) 11.
- [46] D.A. Redfern, W. Fang, and K. Ito, Low temperature saturation of p-n junction laser beam induced current signals, Solid-State Electronics 48 (2004) 409.

- [47] C. A. Musca, J. M. Dell, L. Faraone, J. Bajaj, T. Pepper, K. Spariosu, J. Blackwell and C. Bruce, Analysis of crosstalk in HgCdTe p-on-n heterojunction photovoltaic infrared sensing arrays, *Journal of Electronic Materials* 28 (1999) 617.
- [48] L. Karp, Charles A. Musca, John M. Dell, and Lorenzo Faraone, Characterization of crosstalk in HgCdTe n-on-p photovoltaic infrared arrays, *Proceedings of SPIE* 5274 (2004) 183.
- [49] 应承平, 红外焦平面阵列串音测试技术研究, *计测技术*, 2 (2006) 24.

第二章 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的光学和电学性质研究

2.1 前言

$\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 是 PbSe 材料的一种重要三元合金, Mn 组分的加入可以增大 PbSe 材料的禁带宽度, 使得 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料在红外光探测和发射方面具有更广泛的波长应用范围; 同时, 也使得 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料可以作为 PbSe 量子阱的势垒材料。从有关 PbSe 和 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 的文献来看^[1-5], 对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料光学和电学研究有待进一步深入。因此我们开展了对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料的光学和电学测量和分析。需要说明的是, 以往的 IV-VI 族半导体薄膜绝大部分是生长在非半导体材料 BaF_2 衬底上的, 而我们的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料是生长在具有较好机械性能的半导体材料 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底上的, 因此更具有器件应用价值。

本章首先分析 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的变温透射光谱。然后介绍室温下入射光子能量在 1.25 eV - 4.5 eV 范围内的反射光谱测量和 1.5 eV - 4.5 eV 范围内的椭圆偏振光谱测量结果以及 Raman 测试结果。最后分析 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的 10 K-300 K 的变温 Hall 测量结果。

2.2 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 初步表征

实验中所用的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料是采用经过化学机械 (chemo-mechanically) 抛光的 [111] 方向生长的 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 材料作为衬底, 在固源分子束外延系统 (solid source molecular beam epitaxy, SSMBE) 中生长而成的。利用扫描电子显微镜 (SEM) 对薄膜样品的切面进行了观察。图 2-1 (a) 显示薄膜样品的厚度均匀。从图 2-1 (b) 中可以确定 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的厚度约为 1.7 μm 。

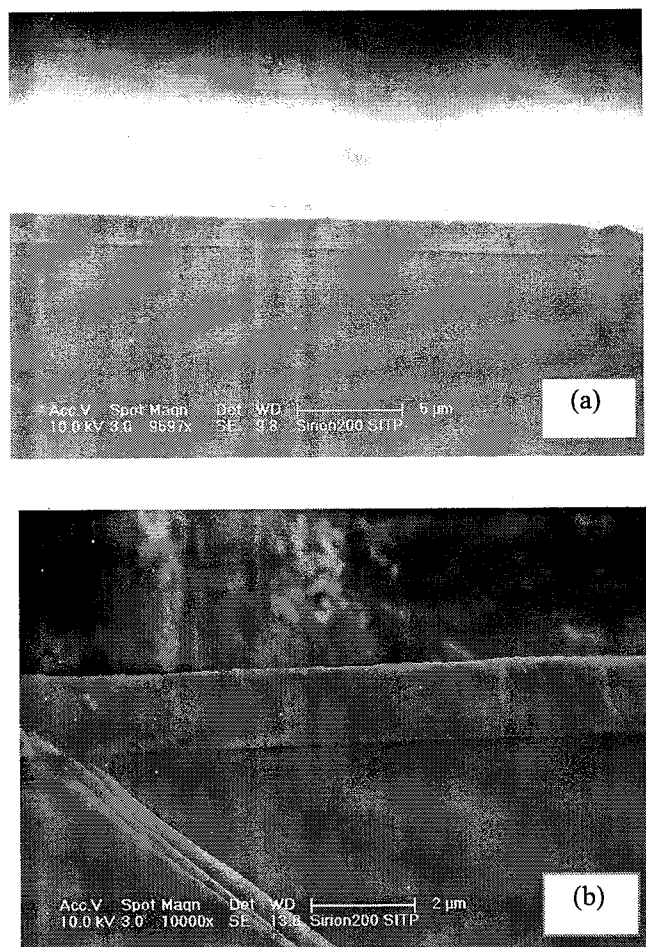
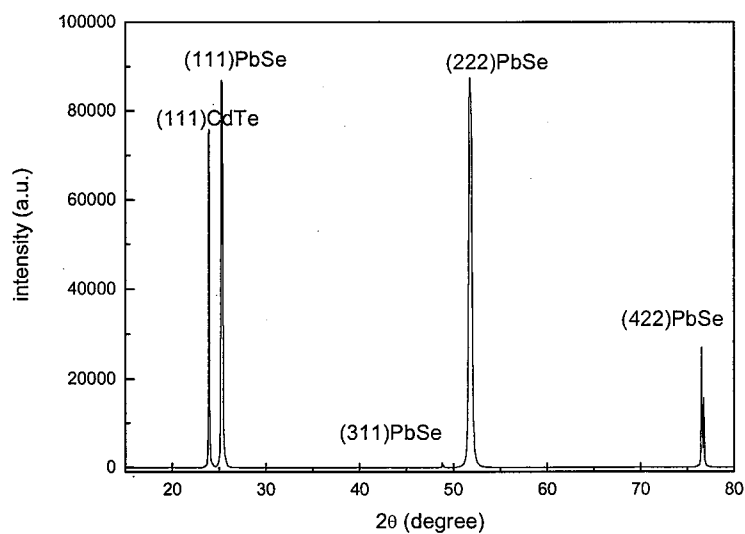
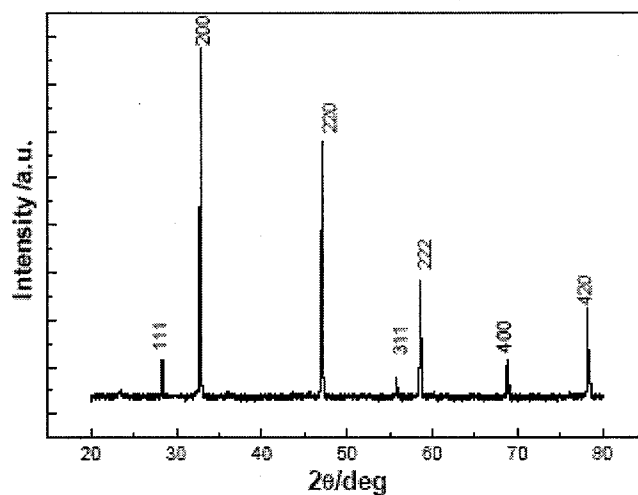


图 2-1 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜横切面的 SEM 观察

IV-VI 族半导体材料通常为 NaCl 结构, IVA 族元素和 VIA 族元素分别形成一套面心立方结构。图 2-2 为一种 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ($x < 0.05$) 薄膜材料的 XRD 图谱。图中 $2\theta = 24^\circ$ 的峰为衬底 CdTe(111) 面的衍射峰^[6]。由于我们的材料是沿 (111) 方向生长的, 因此在衍射图谱中可以清晰看到 PbSe(111) 和 (222) 面的衍射峰。同时还观察到了 PbSe(422) 面的衍射峰。这表明薄膜材料为 NaCl 结构, 具有 (111) 方向的择优取向。PbSe 各衍射峰的确定可以参考表 2-1^[7]中所列出的数据。MnSe 有三种结构: NaCl 结构的 $\alpha\text{-MnSe}$, 闪锌矿结构的 $\beta\text{-MnSe}$ 和纤锌矿结构的 $\gamma\text{-MnSe}$ 。其中 NaCl 结构为稳定结构。图 2-3 给出了 $\alpha\text{-MnSe}$ 粉末 XRD 图谱^[8]。对比图 2-2 和图 2-3, 可以认为 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ($x < 0.05$) 薄膜材料没有析出 MnSe 相。由此可以认为, Mn 元素是以掺杂原子的形式存在于 PbSe 薄膜中的^[9]。

图 2-2 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜 XRD 图谱表 2-1^[7] PbSe 材料各衍射峰的确定

2θ (deg)	d (Å) Exp.	d^* (Å) ASTM	hkl
25.20	3.532	3.536	111
29.20	3.055	3.062	200
41.60	2.169	2.165	220
49.45	1.841	1.846	311
41.50	1.773	1.768	222
68.30	1.372	1.369	420
75.75	1.255	1.250	422

图 2-3 α -MnSe 粉末 x-射线衍射图谱^[8]

$\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜中 Mn 组分的确定是利用 Mn 组分与 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 禁带宽度的关系 $E_g=0.277+0.00175\exp(x/0.0142)^{[5]}$ 。Hall 实验表明, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜为 p 型, 空穴浓度在 77 K 时为 $p=1\times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 迁移率为 $2200 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$; 随着温度增加到 300 K, 空穴浓度增大为 $p=5\times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 而迁移率减少到 $400 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 。

2.3 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的变温透射光谱研究

2.3.1 实验方法

对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料的变温透射光谱的测量采用的是 Bruker IFS-113v 型傅立叶变换红外光谱仪, 傅立叶变换红外 (FTIR) 光谱仪的工作原理: 光源发出的光经过干涉仪后变成干涉光, 这种干涉光经过样品后, 被探测器探测得到干涉图, 最后通过计算机把干涉图进行傅立叶变换得到样品的光谱。FTIR 光谱仪由光学测量系统, 计算机数据处理系统, 计算机接口和电子线路系统等部分组成。光学测量系统用来测量收集数据, 计算机接口和电子线路系统负责把光学系统所得到的电信号放大、滤波、模数转换并送到计算机的数据处理系统, 同时帮助计算机控制光学检测系统的机械运动。计算机数据处理系统负责对这整个光谱仪进行控制, 并进行数据采集和处理。我们实验中所使用的光源为硅碳棒, 分束片为 KRS5, 探测器为室温热敏探测器 (DLATGS)。测量波长范围为 $400\text{-}4000 \text{ cm}^{-1}$, 分辨率为 4 cm^{-1} ; 采用连续流杜瓦, 窗口类型为 KRS5。

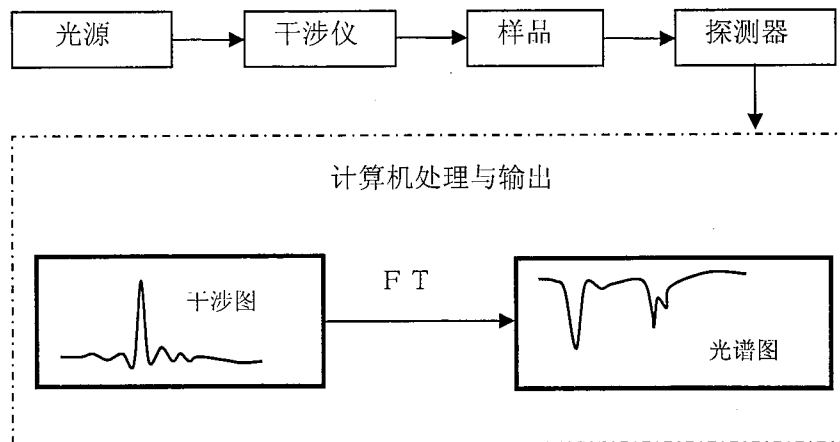


图 2-4 傅立叶变换红外 (FTIR) 光谱仪的工作原理示意图

2.3.2 透射光谱的计算

在带隙附近, 介电函数主要由 E_0 临界点的性质决定, 背景介电常数对于能量是缓变的, 因此可以视其为常数。在 MDF (model dielectric function) 理论框架下^[10], E_0 临界点跃迁是通过跃迁能量 E_g , 跃迁振子强度 A , 和展宽因子 Γ 来刻画的。由于 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料为窄禁带半导体, 因此对透射光谱的拟合所使用的介电函数是一个基于 $k \cdot p$ 微扰理论、并且考虑到带边非抛物线性的复介电函数, 如下式 (2-1) 所示^[4],

$$\hat{\epsilon}(E+i\Gamma) = \epsilon_{\infty} + A \left(\frac{1}{2\sqrt{2}} + \frac{2}{\pi} \right) - \frac{2A}{\pi} \frac{[(E+i\Gamma)^2 - E_g^2]^{1/2}}{E} \tanh^{-1} \left[\frac{E+i\Gamma}{[(E+i\Gamma)^2 - E_g^2]^{1/2}} \right], \quad (2-1)$$

其中, E 为入射光子的能量, E_g 、 A 和 Γ 分别带隙、带间跃迁的振子强度和展宽因子, ϵ_{∞} 为包括 E_1 、 E_2 和 E_3 等阶跃迁的背景介电函数。由于在所研究的能量范围内 ϵ_{∞} 为缓变的, 因此认为它是与 E 无关的常数。理论的折射率和消光系数可由公式 (2-2) 得到。

$$\begin{aligned} n(E) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [\text{Re}^2(\hat{\epsilon}) + \text{Im}^2(\hat{\epsilon})]^{1/2} + \text{Re}(\hat{\epsilon}) \} \\ k(E) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [\text{Re}^2(\hat{\epsilon}) + \text{Im}^2(\hat{\epsilon})]^{1/2} - \text{Re}(\hat{\epsilon}) \} \end{aligned} \quad (2-2)$$

在此, $n(E)$ 和 $k(E)$ 分别为复折射率 $\tilde{n}(E)$ 的实部和虚部, 即, $\tilde{n}(E) = n(E) + ik(E)$ 。然后利用薄膜光学知识^[11], 可以对光通过 $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ 衬底 (折射率为 2.754) 和 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的透过率进行计算。具有 n 层的多层膜系的干涉矩阵为

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^k \begin{pmatrix} \cos \delta_r & i \sin \delta_r / \tilde{n}_r \\ i \tilde{n}_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ n_{k+1} \end{pmatrix} \quad (2-3)$$

其中, 对于第 r 层薄膜, $\delta_r = 2\pi \tilde{n}_r d_r / \lambda$, δ_r 为入射光的相因子, d_r 为该层薄膜的厚度, $\tilde{n}_r$ 为第 r 层薄膜材料的复折射率 $\tilde{n}_r = n_r + ik_r$, n_{k+1} 多层薄膜出射介质的折射率。于是, 通过多层膜系的透过率和反射率为

$$T = \frac{4n_0 n_{k+1}}{(n_0 B + C)(n_0 B + C)^*} \quad (2-4)$$

$$R = \left(\frac{n_0 B - C}{n_0 B + C} \right) \left(\frac{n_0 B - C}{n_0 B + C} \right)^*$$

其中 n_{k+1} 为多层膜入射介质的折射率。由于衬底 $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ 的厚度约为 1 mm，远大于中红外光的波长，因此在计算中只考虑衬底表面对光波的振幅反射。在不考虑光波在衬底的吸收和各个表面和界面光波损失的情况下，对于如下图2-5 所示的厚膜，其对光波的透过率为

$$T_t = \frac{T_a^+ T_b^+}{1 - R_a^- R_b^+} \quad (2-5)$$

其中, T_a^+ 和 R_a^- 由上面的公式(2-4)求得。再根据如下关系式

$$R_b^+ = \left(\frac{n_{\text{sub}} - 1}{n_{\text{sub}} + 1} \right)^2 \quad (2-6)$$

$$T_b^+ = 1 - R_b^+$$

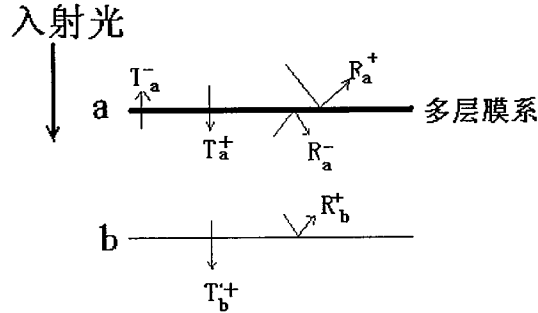


图 2-5 光通过多层膜系和衬底的传播示意图

就可以求得光通过膜系的理论透过率。在拟合过程中, 拟合参数包括 E_g 、 A 、 Γ 和 ϵ_∞ 。利用拟合得到的这些参数和公式(2-2)可以计算折射率 n 和消光系数 k 。再利用 $\alpha = 4k\pi/\lambda$ 可以得到吸收系数。

2.3.3 结果与讨论

$\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的带隙对应的光子波长范围约为 3—5 μm , 而 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底在这个波段对光是透明的, 并且其光学常数在 400-4000 cm^{-1} 范围内是缓变的, 因此这为利用透射光谱研究 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的

光学性质提供了可能。下图 2-6 为 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜在不同温度下的透射光谱。其中图 2-6 (a) 为 $\text{Pb}_{0.952}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$; 图 2-6 (b) 为 $\text{Pb}_{0.952}\text{Mn}_{0.048}\text{Se}$; 图 2-6 (c) 为对其中一条透射光谱的拟合效果, 实线为计算得到的透射光谱, 空心圆圈为部分实验数据。图中 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的透过率已经被 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底的透过率归一化。

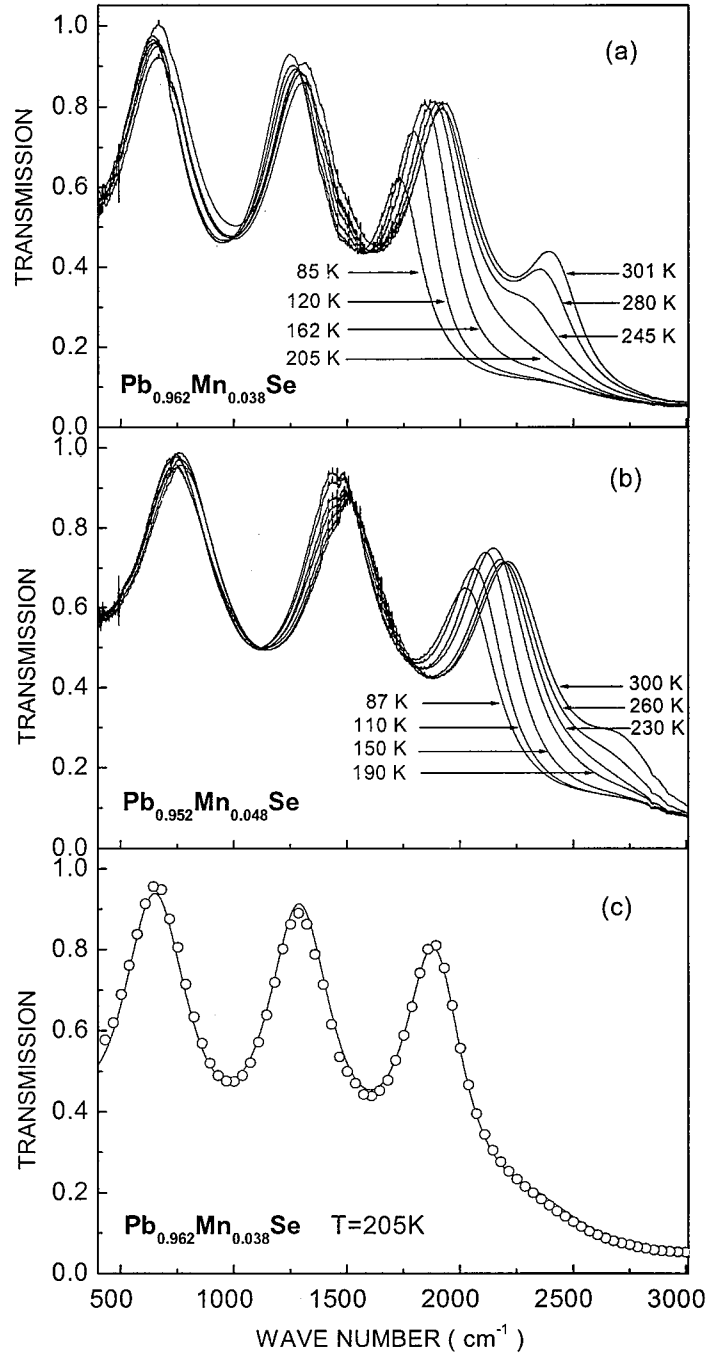


图2-6 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜在不同温度下的透射光谱. 其中图 (a) 为 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$; 图 (b) 为 $\text{Pb}_{0.952}\text{Mn}_{0.048}\text{Se}$; 图 (c) 为对其中一条透射光谱的拟合效果, 实线为计算得到的透射光谱, 空心圆圈为部分实验数据. $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的透过率已经被 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底的透过率归一化

通过对透射光谱的拟合,得到了 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料的带边的微观光学参数和宏观光学性质随温度的变化规律。这些光学参数包括禁带宽度、展宽因子、振子强度和背景介电常数;宏观光学性质包括禁带宽度附近的折射率和吸收系数,以及从吸收系数提取到的 Urbach 带尾参数。下面以 Mn 组分为 3.8% 的样品为例分别加以说明。

2.3.3.1 禁带宽度、展宽因子、振子强度和背景介电常数的变温特性

图 2-7 为 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料的带边的光学参数随温度的变化情况。图 2-7 (a) 显示,禁带宽度 E_g 随着温度从 85 K 上升到 301 K 而线性增加,满足关系式 $E_g(\text{eV})=0.1807+4.06\times 10^{-4}T$ 。其中的温度系数 $4.06\times 10^{-4} \text{ eV}\cdot\text{K}^{-1}$ 与 PbSe 材料的温度系数 $3.95\times 10^{-4} \text{ eV}\cdot\text{K}^{-1}$ 非常接近。^[12]

展宽因子 Γ 随温度增加而增加,从 85 K 的 4 meV 增大到 301 K 的 21 meV。为了了解展宽因子 Γ 所反映的材料特性,采用一个基于 Bose-Einstein 统计的唯象模型^[13]对实验数据进行了拟合,图 2-7 (b) 中的实线即为拟合结果。采用的唯象公式如下

$$\Gamma = (\Gamma_0 + \Gamma_1) + \left[\frac{2\Gamma_0}{e^{\Theta/T} - 1} \right] \quad (2-7)$$

其中, $\Gamma_0 + \Gamma_1$ 的大小与材料中的俄歇过程和合金起伏有关; $2\Gamma_0$ 则体现的是电子-声子相互作用的大小^[14], Θ 是材料散射过程中参与的声子的平均温度^[13, 15]。拟合结果显示 $\Gamma_0 + \Gamma_1$ 为 4.8 meV; $2\Gamma_0$ 为 114.2 meV; Θ 为 628 K。对 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 的声子平均温度 Θ 与常见的半导体材料 Si 和 GaAs 进行了比较。Si 为 525 K^[14], GaAs 为 337 K^[16], 两者均低于 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 。从中可以看出,相比于通常的半导体材料, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料具有较强的电子声子相互作用。

拟合得到的振子强度 A 随着温度的上升而逐渐增加,如图 2-7 (b) 所示。由 $k\cdot p$ 微扰理论可以推导得到振子强度 A 的表达式^[4]

$$A = 4.8 \left[\frac{2 \left(\frac{2P_{\perp}^2}{m_0} \right) + \left(\frac{2P_{\parallel}^2}{m_0} \right)}{\left(\frac{2P_{\perp}^2}{m_0} \right) \left(\frac{2P_{\parallel}^2}{m_0} \right)^{1/2}} \right] K \quad (2-8)$$

其中 $P_{\perp}$ 和 $P_{\parallel}$ 分别为横向和纵向动量矩阵元; m_0 为自由电子有效质量; $K(\leq 1)$ 为远带对带边振子强度的贡献。令代表能带各向异性的 $\gamma = P_{\perp} / P_{\parallel}$, 则公式 (2-8) 可以改写为 $A = 4.8 \frac{m_0^{1/2}}{\sqrt{2P_{\parallel}}} \left(2 + \frac{1}{\gamma^2} \right) K$ 。 K 和 γ 通常被认为不随温度发生显著变化, 因此可以近似认为振子强度 A 的变化只与带间跃迁的动量矩阵元 $P_{\perp}$ 和 $P_{\parallel}$ 有关。从这个观点出发, 结合实验结果, 可以认为的动量矩阵元 $P_{\perp}$ 和 $P_{\parallel}$ 随着温度的升高而下降。这个结论同文献报道中关于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.206$)^[17] 和 PbTe ^[18] 材料的动量矩阵元的温度变化特性是一致的。从图 2-7(b) 中还可以看出振子强度 A 随着温度升高并不是线性增加的。出现这种非线性性的原因还不清楚。但对另一个样品 $\text{Pb}_{0.952}\text{Mn}_{0.048}\text{Se}$ 的拟合结果显示, 其振子强度 A 随着温度的升高几乎是线性增加的。因此我们认为, 图 2-7(b) 中振子强度 A 随着温度升高的非线性增加不是一个普遍现象。另外, $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 材料的背景介电函数 ϵ_{∞} 随温度的升高而下降, 如图 2-7(c) 所示。表 2-2 给出了 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 在 85 K 和 301 K 时拟合得到的参数数值。

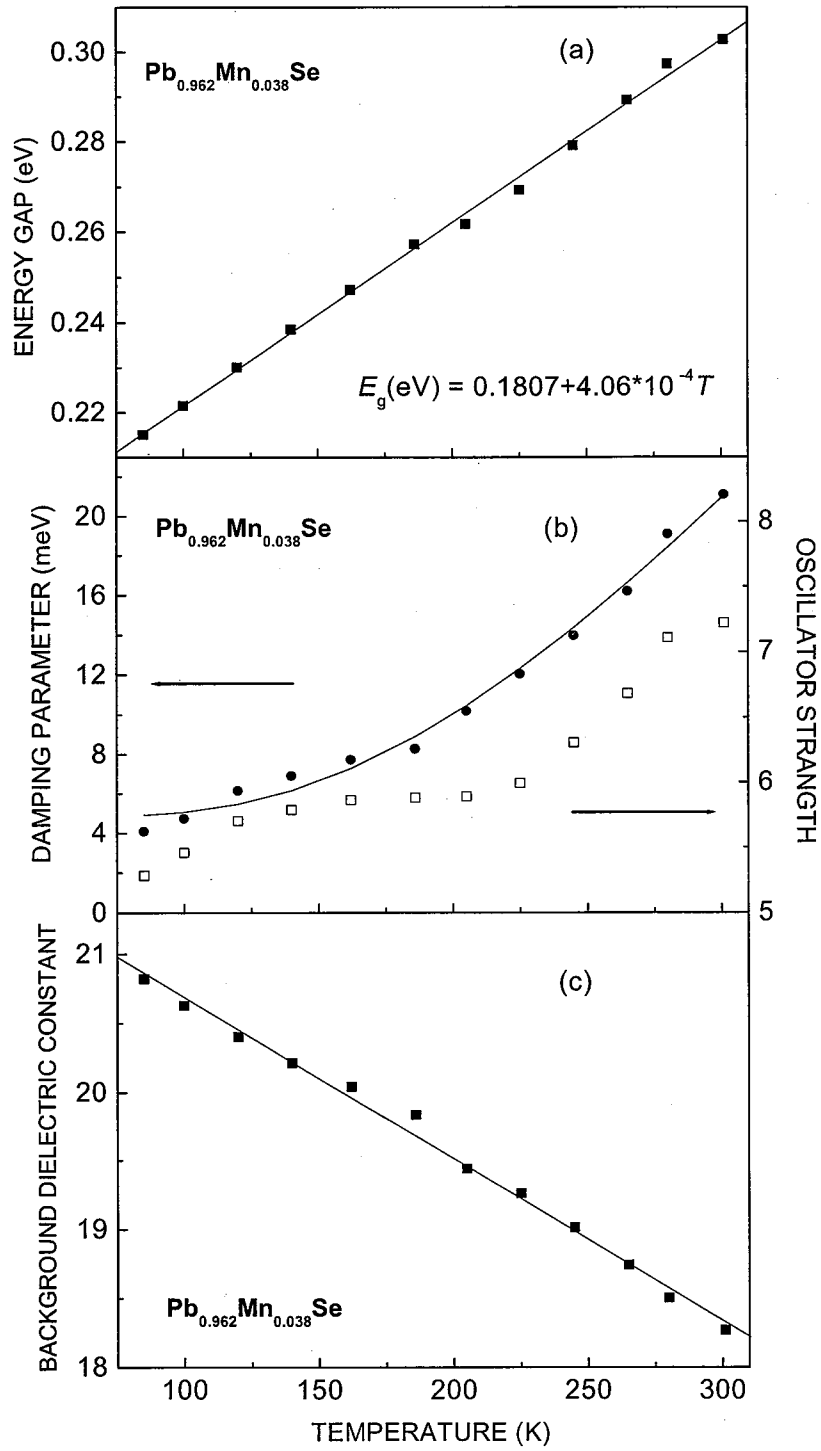


图 2-7 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 材料的带边的光学参数随温度的变化规律.

(a) 禁带宽度 E_g (实方块为实验数据, 直线为对实验数据的线性拟合); (b) 为展宽因子 Γ 和振子强度 A (实心菱形为展宽因子的

实验数据，实线为对展宽因子 Γ 的拟合曲线，空心方块为振子强度

实验数据); (c) 为背景介电函数 ϵ_{∞}

表 2-2 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 在 85 K 和 301 K 时拟合得到的参数数值

T (K)	E_g (eV)	Γ (meV)	A	ϵ_{∞}
85	0.215	4.1	5.29	20.8
301	0.303	21.1	7.22	18.3

2.3.3.2 折射率、吸收系数以及 Urbach 带尾参数的变温特性

图 2-8 给出了 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 在 85 K 和 301 K 时带边附近的折射率。由于 Mn 的加入， $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 的折射率低于 PbSe 材料。然而，通过计算发现， $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 禁带宽度处的折射率温度系数 dn/dT 与 PbSe 材料的 $-8.2 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ 非常接近^[19]。表 2-3 列举了 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 在禁带宽度附近的折射率。

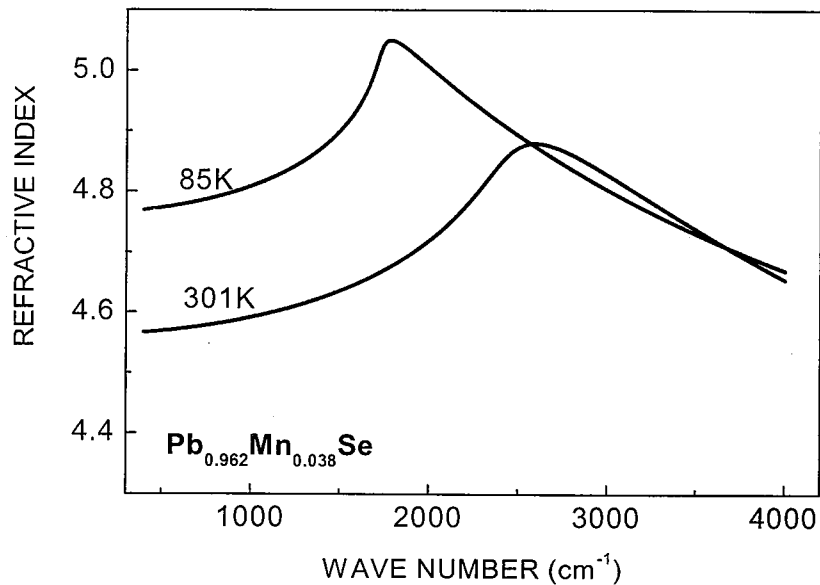


图 2-8 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 在 85 K 和 301 K 时带边附近的折射率

表 2-3 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 在禁带宽度附近的折射率

	PbSe^a		$\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$	
	77K	300K	85K	301K
Refractive index	5.30	5.06	5.04	4.86

^a取自参考文献[2]

$\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 薄膜的吸收系数随温度的变化情况如图 2-9 (a) 所示。随着温度的升高,带边蓝移,并且带边的斜率发生显著变化。为了定量分析禁带宽度下带边斜率的变化,对吸收系数采用如下公式(2-9)进行拟合^[20, 21]。

$$\alpha(\hbar\omega) = \alpha_0 \exp[(\hbar\omega - E_g)/E_u] \quad (\hbar\omega < E_g), \quad (2-9)$$

其中, E_g 是 0 K 时的禁带宽度; α_0 为 E_g 对应的吸收系数; E_u 为 Urbach 带尾参数^[22]。经过拟合得到的 E_u 随温度的变化情况如图 2-9 (b) 所示。对于 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 薄膜,在 85 K 时的 E_u 为 8 meV; 在 301 K 时为 32 meV。对于通常的半导体材料,在低温时的带尾参数主要由材料中的结构无序造成, E_u 一般小于 10 meV^[23], 结构无序造成的带尾参数随温度几乎不发生太大变化。随着温度的升高,电子声子相互作用的贡献逐渐增强, E_u 逐渐变大。但对于 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 薄膜,其在室温的带尾参数大于晶体 GaAs 和 Si^[23] (后两者均小于 15 meV), 而小于多晶 Si 的 5 meV^[20]。表 2-4 为 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 薄膜的 Urbach 带尾参数 E_u 与晶体 GaAs 和 Si 的 Urbach 带尾参数 E_u 的比较。对应带边展宽因子的结论,在此同样可以认为 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 薄膜比通常半导体材料具有较高的电子声子相互作用。

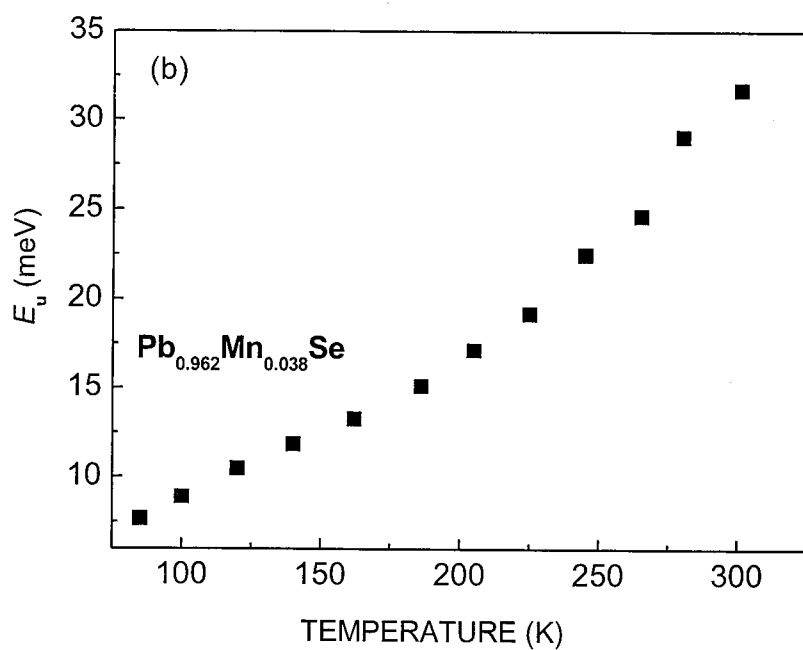
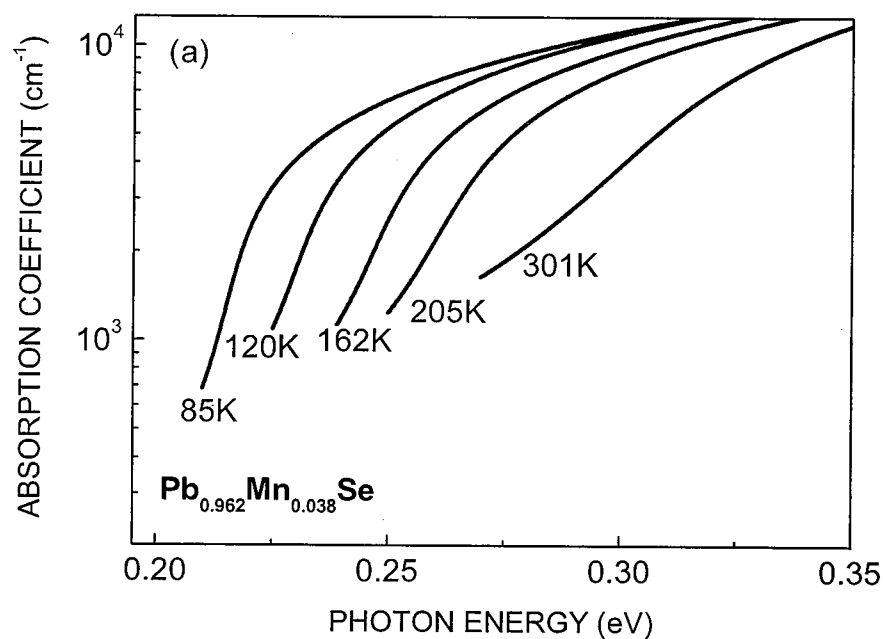


图 2-9 (a) $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ 从 85 K 到 301 K 时带边附近的吸收系数; (b) Urbach 带尾参数 E_u 随温度的变化情况

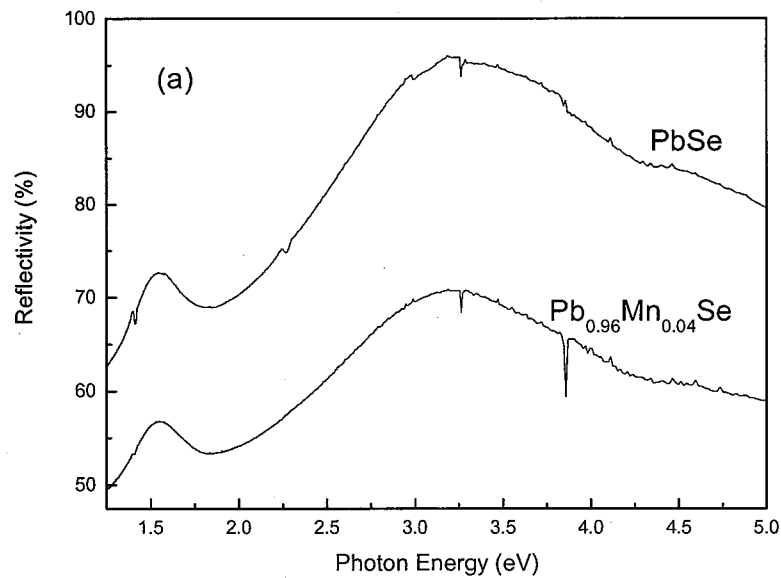
表 2-4 $\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$ Urbach 带尾参数 E_u 与晶体 GaAs 和 Si 的比较

	$\text{Pb}_{0.962}\text{Mn}_{0.038}\text{Se}$		GaAs^a		Si^a		Amorp. Si^b	
	85K	301K	77K	300K	77K	300K	77K	300K
$E_u(\text{meV})$	8	32	1.5	2.6	10	13	55	65

^a 取自参考文献[23]^b 取自参考文献[20]

2.4 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜的反射与椭圆偏光谱

对 PbSe 和 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜进行了 1.25 eV - 4.5 eV 范围内的室温反射测量。得到的反射谱如图 2-10 所示, PbSe 的反射谱与文献^[24]报道的 PbSe 的反射谱大致相同。从图 2-10 中也可以看出, PbSe 和 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜的反射谱结构没有明显差别。由此推断, 在 Mn 掺杂不是很高的情况下, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料的高阶临界点没有发生明显的变化。图 2-11 给出了 1.5 eV - 4.5 eV 范围内的椭圆偏振光测量结果。结果显示材料的反射谱同介电函数的虚部具有大致相同的结构。椭圆偏振光测量所得到的介电函数的实部和虚部与文献^[10]上报道的 PbSe 材料的结果没有明显的差别。



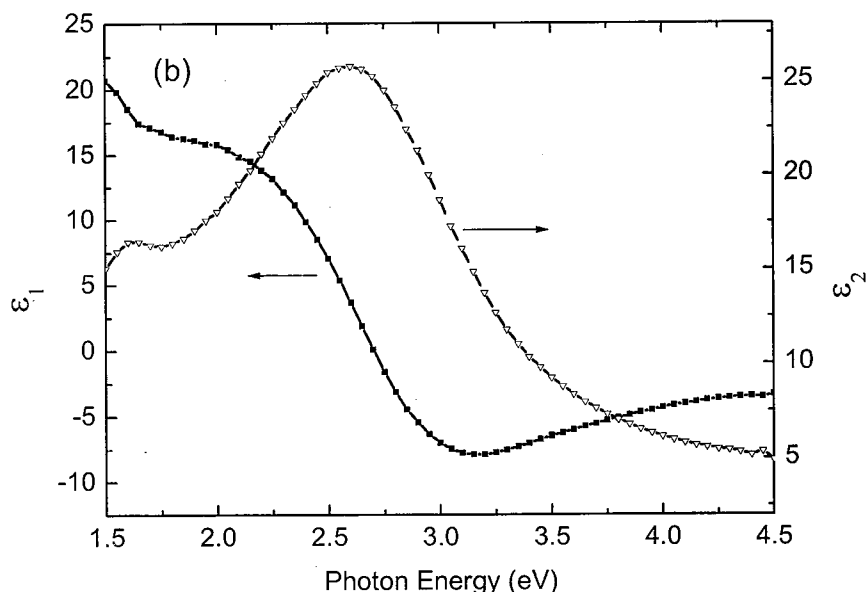
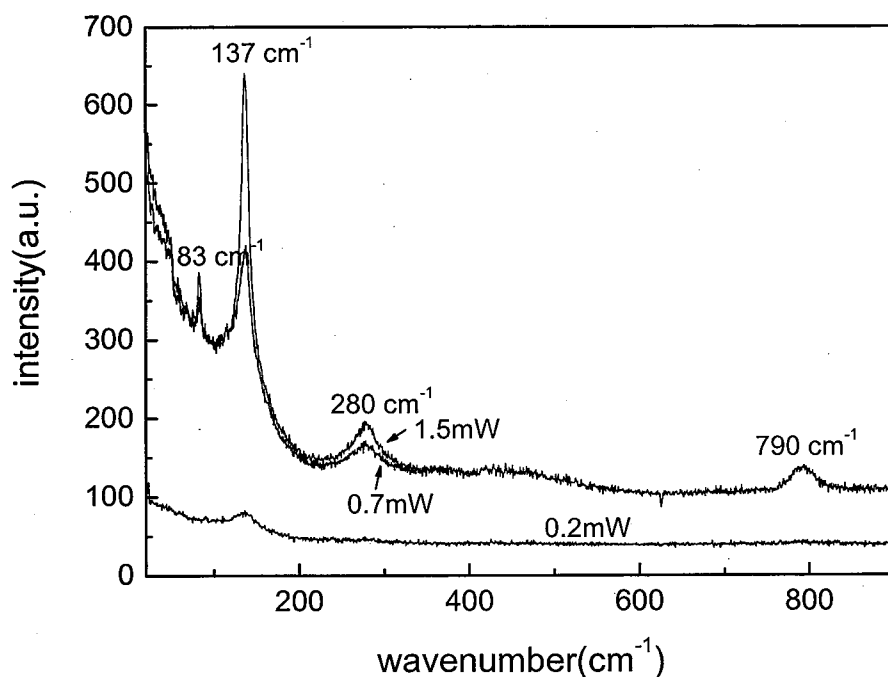


图 2-10 (a) $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜材料室温下反射谱 (1.25 eV - 4.5 eV);
(b) $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜材料室温下介电函数 (1.5 eV - 4.5 eV)

2.5 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜的拉曼光谱

对 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜进行了 Raman 测试。实验中采用的激发光源为 514.5 nm 的 Ar^+ 离子激光。采用背散射配置。入射激光功率分别为 0.2 mW、0.7 mW 和 1.5 mW，实验结果如图 2-12 所示。当激光功率为 0.7 mW 和 1.5 mW 时，可以清晰看到位于 83 cm^{-1} 、 137 cm^{-1} 、 280 cm^{-1} 和 790 cm^{-1} 的四个峰。对比已有的理论^[25]和实验^[26]结果，可以认定 83 cm^{-1} 、 137 cm^{-1} 和 280 cm^{-1} 的峰分别对应类 PbSe 的 $2\text{TO}(\Gamma)$ 、 $\text{LO}(\Gamma)$ 和 $2\text{LO}(\Gamma)$ 模式频率。在我们的实验结果中只看到了类 PbSe 的 Raman 峰，而没有观察到类 MnSe 的 Raman 峰，CdZnTe 衬底的 Raman 峰也没有看到。位于 790 cm^{-1} 的峰可能对应 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 材料中的极化子的基态能量。^[27] 当激光功率为 0.2 mW 时，只有大约位于 137 cm^{-1} 的 Raman 峰出现，且峰形明显变宽。另外，当激光功率较强或照射样品时间过长时，Raman 光谱仪的 CCD 显示 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜表面被激光照射的部分与其他部分的颜色对比度增加。这可能是因为 IV-VI 族半导体材料的导热性较差，高能量或长时间的激光照射有可能使材料特性发生改变。

图 2-11 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜室温下 Raman 光谱

2.6 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的变温 Hall 测量

2.6.1 实验方法

本文中对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ($x=0.04$ 和 0.05) 薄膜的电学测试手段为变磁场和变温度的 Hall 测量。磁场变化范围约为 $0-1\text{ T}$ 。温度变化范围约为 $10-300\text{ K}$ 。采用 Keithley-2000 数字万用表采集电学信号。实验时, 样品的电极是由 In 点焊形成的。样品的测量配置为范德堡法。测量时磁场垂直于薄膜样品。

2.6.2 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜载流子浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况

对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ($x=0.04$ 和 0.05) 薄膜的 Hall 测量显示样品为 p 型, 空穴浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况如图 2-12 所示。图 2-12 (a) 为空穴浓度随温度的变化情况。从 10 K 到 50 K , $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 的空穴浓度几乎不随温度变化, 此时材料处于非本征激发区; 随着温度的进一步增加, 空穴浓度随着温度的增加而明显增加, 材料处于本征激发区。低温时空穴的“冻出”效应没有

出现。在整个测量温度范围内, $\text{Pb}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Se}$ 的空穴浓度大于 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 的空穴浓度。由于测量样品既存在占主体的 Pb 空位掺杂和又含有 Mn 掺杂, 因此不同 Mn 组分的样品中空穴浓度的差异并不能说明 Mn 组分的增加导致较高的载流子浓度。

图 2-12 (b) 为 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 样品的 Hall 迁移率随温度的变化情况。在 10 K 时, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 样品的迁移率约为 $2000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, 远低于 PbSe 材料的迁移率^[28]。这可能是由于 Mn 掺杂造成材料中的缺陷增加从而增加了对载流子的散射作用。一般来说, 半导体材料在低温时载流子主要受到各种杂质散射, 高温时则主要受晶格散射。从图 2-12 (b) 来看, 温度在 10 K 到约 70 K 之间时, 影响 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜空穴迁移率的主要是电离杂质散射; 从 70 K 到 300 K, 以极性光学声子为主的晶格散射对空穴的散射逐渐起支配作用, 导致迁移率迅速下降。从图中还可以看出 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 和 $\text{Pb}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Se}$ 的迁移率在 10K 到 300K 范围内几乎相等。考虑到影响空穴迁移率的多种因素, 我们的结果很难说明 Mn 组分的改变是否影响材料中的空穴迁移率。

图 2-12 (c) 为 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 样品的电阻率随温度的变化情况。随着温度升高, $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的电阻率不断升高。我们测量得到的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜样品电阻率明显高于文献^[2,29]中报道过的 PbSe 材料的电阻率。这可能与我们的样品的载流子浓度和迁移率均低于上述文献中相应的数值有关。对比图 2-12 (a) 和 (c) 还可以看出, $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 的空穴浓度低于 $\text{Pb}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Se}$ 的空穴浓度, 而电阻率的对比结果则与空穴浓度的情况相反。

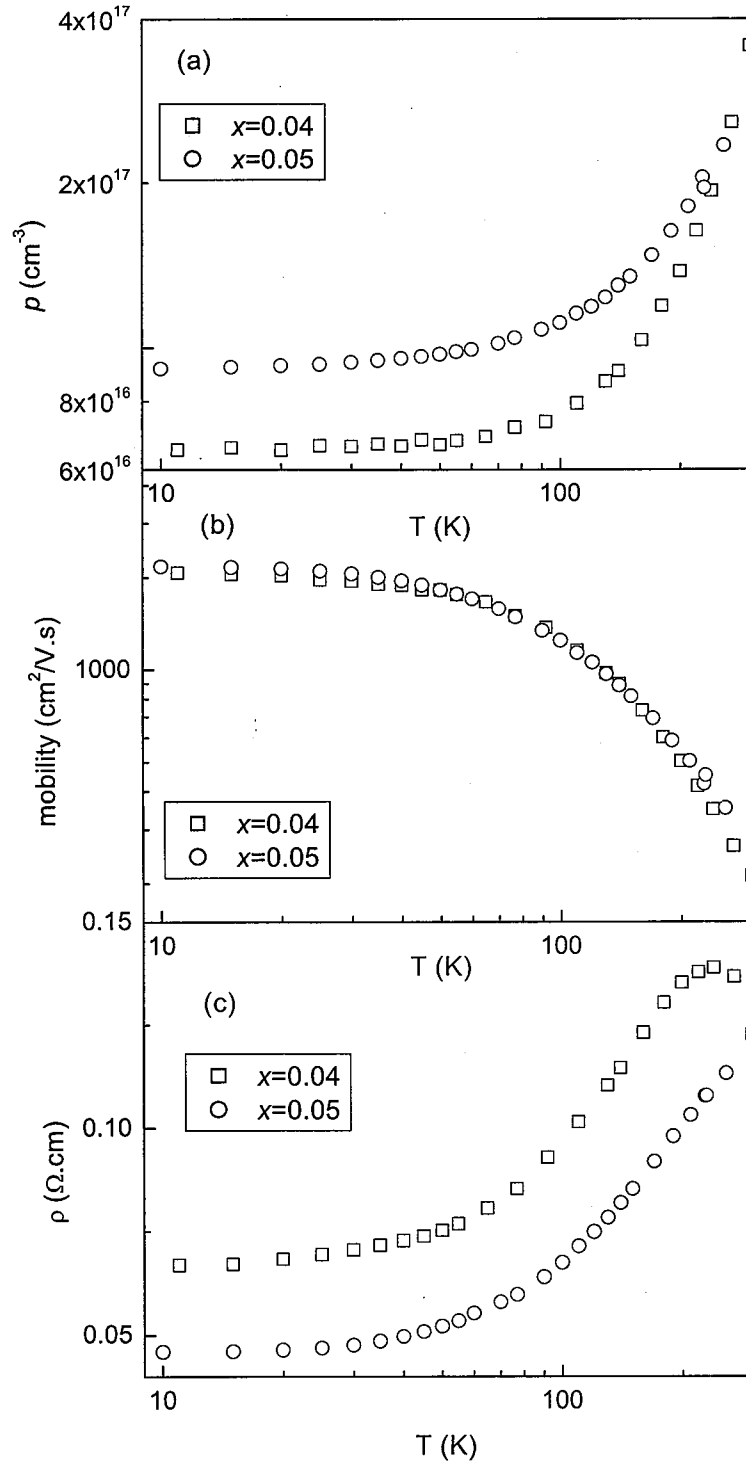


图 2-12 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ($x=0.04$ 和 0.05) 薄膜的空穴浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况. 其中, (a) 为空穴浓度; (b) 为迁移率; (c) 为电阻率

我们还对另一个 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜进行了变温 Hall 测量, 结果显示样品同样为 p 型。其空穴浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况如图 2-13 所示。图 2-13 (a) 为空穴浓度随温度的变化情况。相比于图 2-12 (a) 中描述的同样 Mn 组分的样品的空穴浓度, 图 2-13 (a) 中描述的样品在 100 K 以下具有较高的空穴浓度。大约在 30 K 以下时似乎存在着空穴的“冻出”效应。

图 2-13 (b) 为迁移率随温度的变化情况。150 K 以下时迁移率是随温度升高的, 当温度上升到大约 150 K 时迁移率达到最大值, 而后随着温度的升高迁移率不断下降。并且, 在所有测量温度范围内, 其迁移率的最大值不超过 $300 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 。影响半导体材料迁移率的影响因素很多, 对于 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料可以简单认为影响其迁移率的主要因素为电离杂质散射、晶格散射和合金散射。一般认为电离杂质散射在低温下起主要作用, 晶格散射在高温下起主要作用。随着温度的升高, 电离杂质散射主导的迁移率是上升的; 晶格散射主导的迁移率是下降的; 而合金散射对迁移率的影响的温度依赖性相对较弱。因此可以认为, 图 2-13 所示的 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜材料中存在着较为强烈的电离杂质散射和合金散射, 从而出现了低温时迁移率随着温度的上升而增大, 以及在整个测量温度范围的迁移率较小的现象。图 2-13 (b) 还包括电阻率随温度的变化情况。这个材料的电阻率是随着温度的上升而下降的, 而且电阻率明显高于图 2-12 中所示的两个样品。在此推断, 图 2-13 (b) 中电阻率的温度变化规律取决于材料的空穴浓度以及迁移率水平的温度变化规律。

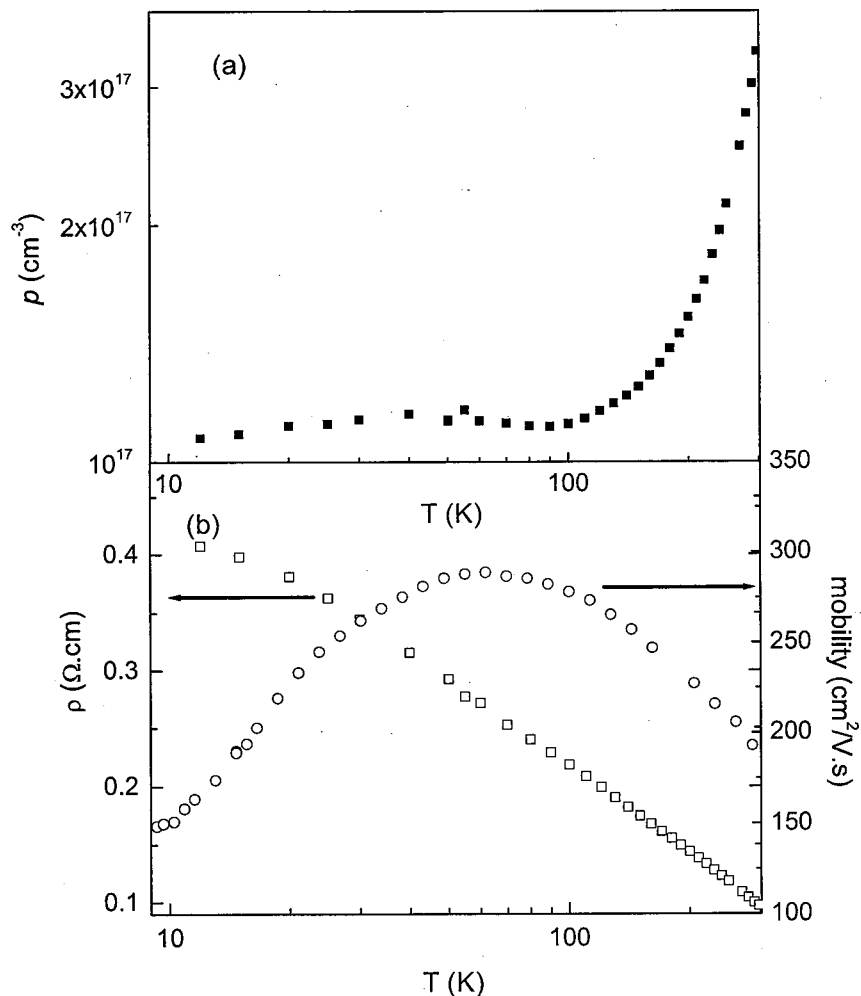


图 2-13 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ ($x=0.04$) 薄膜的空穴浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况. 其中, (a) 为空穴浓度; (b) 为迁移率和电阻率

2.6.3 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜迁移率谱分析

变磁场的 Hall 测量可以得到电导张量随磁场的变化情况, 因此还可以用来进行迁移率谱 (Mobility Spectrum Analysis, MSA) 分析. 迁移率谱分析适合研究多载流子体系中每种载流子的浓度、迁移率以及对电导的贡献. 关于迁移率谱方法的原理和具体计算方法可以参阅相关文献。^[30]

图 2-14 是通过分析和拟合样品 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜的 15 K 和 77 K 的电导

张量所得到的迁移率谱。从图 2-14 中发现 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜材料中存在两种载流子：一种是材料的多子空穴,另一种是电子。其中，具有负迁移率的载流子为电子,正迁移率的为空穴。温度的升高使得每种载流子的迁移率峰宽明显展宽,77 K 时空穴的迁移率峰的范围已经越过横坐标的 0 点，说明材料中的散射增强，噪音变大。

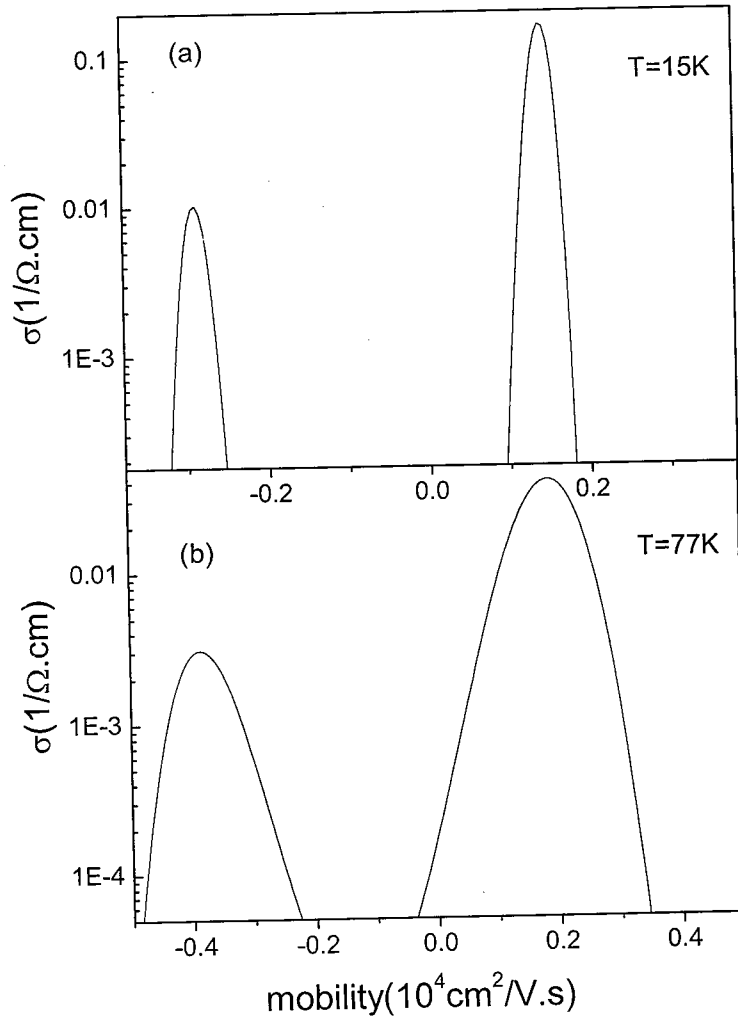


图 2-14 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜在 15 K 和 77 K 时的迁移率谱. 其中具有负迁移率的载流子为电子,正迁移率的为空穴

通过对变温 Hall 数据的迁移率谱分析可以得到样品中每种载流子的浓度、迁移率和电导率随温度的变化情况。图 2-15 是拟合得到的 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜中存在的两种载流子的迁移率、载流子面浓度和电导率随温度的变化关系。从

图 2-15 中可以看出,空穴的各个电学参数随温度的变化情况与图 2-13 中所示的只考虑一种载流子时空穴的电学参数随温度的变化情况大致相同。而对于 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜存在的电子,虽然它的迁移率较高,但由于其浓度较低因此对总电导的影响远小于空穴。并且,这种通过拟合迁移率谱得到的 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜存在的电子的迁移率和浓度几乎不随温度的升高而明显变化,因此这种电子很可能是存在于表面或界面的二维电子。^[31] 由于温度大于 200 K 后样品的 Hall 数据的噪音变大,电子和空穴的迁移率峰值严重展宽,所以没有分析更高温的数据。

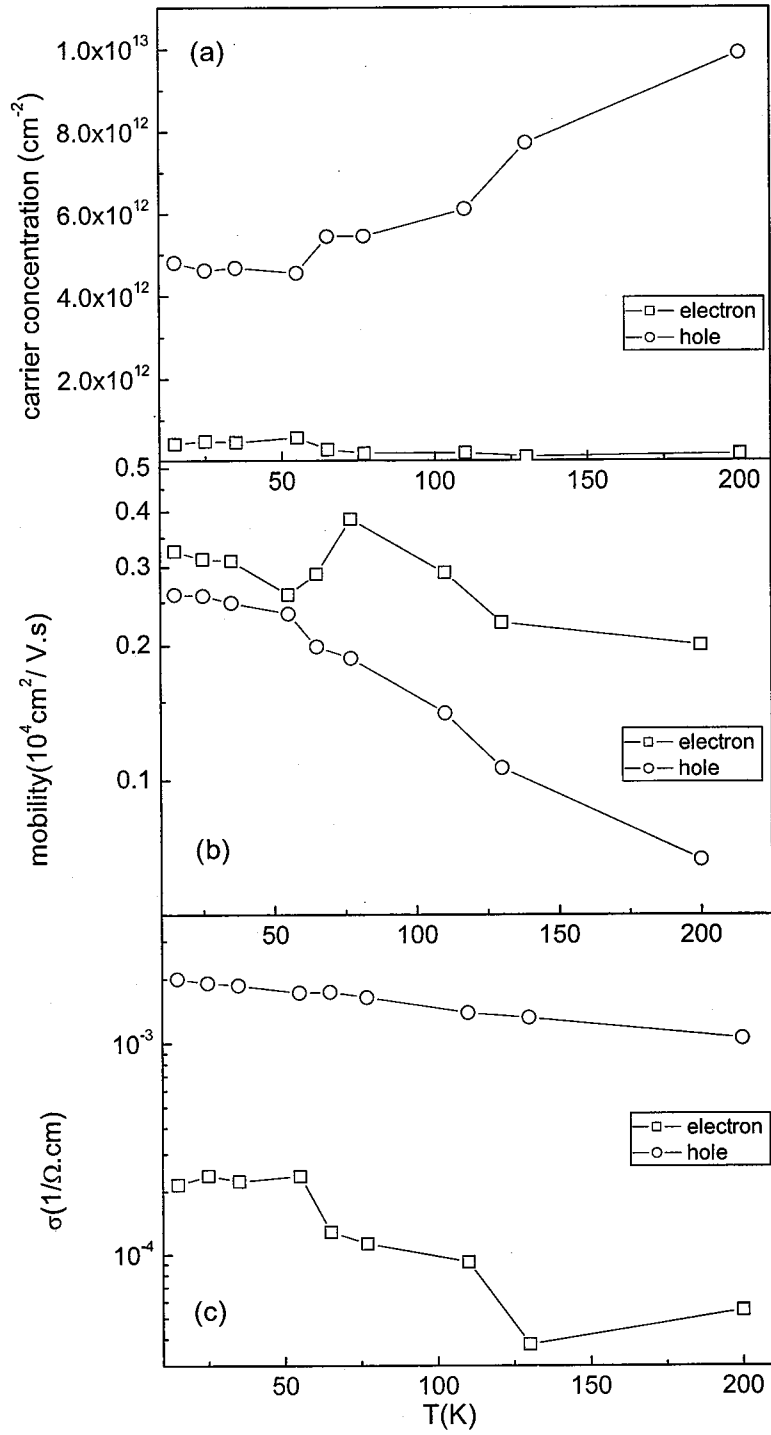


图 2-15 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 薄膜两种载流子迁移率、载流子面浓度和电导率随温度的变化关系.其中, (a) 为载流子面浓度; (b) 为迁移率; (c) 为电导率

2.7 本章小结

本章研究了 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜的光学和电学性质，主要结论如下：

1. 对生长在 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底上的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料进行了变温透射光谱实验。实验温度范围为液氮温度到室温，入射光能量范围为 $400 - 4000 \text{ cm}^{-1}$ 。通过拟合透射光谱，得到了禁带宽度 E_g 、展宽因子 Γ 、振子强度 A 、折射率 n 、吸收系数 α 和 Urbach 带尾参数 E_u 等随温度的变化规律。从中发现，相比于 III-V 族和 IV 族材料，在这种材料中存在着较强的电子-声子相互作用。
2. 对 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 进行的 $1.25 \text{ eV} - 4.5 \text{ eV}$ 范围内的室温反射测量和 $1.5 \text{ eV} - 4.5 \text{ eV}$ 范围内的椭圆偏振光谱测量表明：与 PbSe 材料相比， $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 材料的高阶临界点没有发生明显的变化。
3. Raman 光谱结果显示 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 材料中只存在类 PbSe 的 Raman 峰。
4. 对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 进行了变温 Hall 测量。分析了载流子浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况。通过拟合迁移率谱 (MSA)，发现 p- $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜中除了空穴外，还存在着少量表面或界面的二维电子。

本章参考文献

- [1] F. Geist, H. Pascher, N. Frank, G. Bauer, Interband magnetotransmission and coherent Raman spectroscopy of spin transitions in diluted magnetic $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$, Phys. Rev. B 53 (1996) 3820.
W. Hofmann, U. Fichtel, H. Pascher, N. Frank, G. Bauer, Magneto-optical interband absorption in diluted magnetic $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$, Phys. Rev. B 45 (1992) 8742.
- [2] J. N. Zemel, J. D. Jensen, R. B. Schoolar, Electrical and Optical Properties of Epitaxial Films of PbS, PbSe, PbTe, and SnTe, Phys. Rev. 140 (1965) A330.
- [3] H. K. Sachar, I. N. Chao, P. J. McCann, X. M. Fang, Growth and characterization of PbSe and $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ on Si (100), J. Appl. Phys. 85 (1999) 7398.
C.-E. Blomqvist, P.-O. Nilsson, Optical Properties of Epitaxial PbSe Films, Phys. Rev. 174 (1968) 849.
N. Suzuki, K. Sawai, S. Adachi, Optical properties of PbSe, J. Appl. Phys. 77 (1995) 1249.
- [4] H. Krenn, S. Yuan, N. Frank, G. Bauer, Influence of nonparabolic-energy-band dispersion on the optical constants close to the fundamental absorption in PbSe and $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ epitaxial films, Phys. Rev. B 57 (1998) 2393.
- [5] Wang Qing-Lei, Wu Hui-Zhen, Si Jian-Xiao, Xu Tian-Ning, Xia Ming-Long, Xie Zheng-Sheng, Lao Yan-Feng, Optical properties of $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ thin films, Acta Phys. Sin. 56 (2007) 4950.
- [6] N.W. Duffy, L.M. Peter, R.L. Wang, D.W. Lane, K.D. Rogers, Electrodeposition and characterisation of CdTe films for solar cell applications, Electrochimica Acta 45 (2000) 3355.
- [7] S. Kumar, Z.H. Khan, M.A. Majeed Khan and H. Husain, Studies on thin films of lead chalcogenides, Curr. Appl. Phys. 5 (2005) 561.
- [8] Mingzai Wu, Ying Xiong, Nan Jiang, Min Ning and Qianwang Chen,

- Hydrothermal preparation of $\alpha\text{-MnSe}$ and MnSe_2 nanorods, *Journal of Crystal Growth*, 262 (2004) 567.
- [9] M.M. Ibrahim, S.A. Saleh, E.M.M. Ibrahim, A.M. Abdel Hakeem, Electrical and thermoelectric properties of PbSe doped with Sm , *Journal of Alloys and Compounds*, 452 (2008) 200.
- [10] N. Suzuki, K. Sawai, S. Adachi, Optical properties of PbSe , *J. Appl. Phys.* 77 (1995) 1249.
- [11] H. A. Macleod, *Thin Film Optical Filters*, second ed., Adam Hilger, Bristol, 1986.
- [12] M Baleva, T Georgiev, G Lashkarev, On the temperature dependence of the energy gap in PbSe and PbTe , *J.Phys.: Condens. Matter* 1 (1990) 2935.
- [13] L. Viña, S. Logothetidis, M. Cardona, Temperature dependence of the dielectric function of germanium, *Phys. Rev. B* 30 (1984) 1979.
- [14] P. Lautenschlager, P. B. Allen, M. Cardona, Phonon-induced lifetime broadenings of electronic states and critical points in Si and Ge , *Phys. Rev. B* 33 (1986) 5501.
- [15] S. Logothetidis, L. Viña, M. Cardona, Temperature dependence of the dielectric function and the interband critical points of InSb , *Phys. Rev. B* 31 (1985) 947.
- [16] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, M. Cardona, Interband critical points of GaAs and their temperature dependence, *Phys. Rev. B* 35 (1987) 9174.
- [17] R. G. Mani et al., Magnetophonon effect in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 9146.
- [18] H. Yokoi, S. Takeyama, N. Miura, G. Bauer, Anomalous temperature dependence of the effective mass in n-type PbTe , *Phys. Rev. B* 44 (1991) 6519.
- [19] P. J. McCann, K. Namjou, X. M. Fang, Above-room-temperature continuous-wave mid-infrared photoluminescence from PbSe/PbSrSe quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999) 3608.

- [20] G. D. Cody, T. Tiedje, B. Abeles, B. Brooks, and Y. Goldstein, Disorder and the Optical-Absorption Edge of Hydrogenated Amorphous Silicon, *Phys. Rev. Lett.* 47 (1981) 1480.
- [21] W.Z. Shen, L.F. Jiang, H.F. Yang, F.Y. Meng, H. Ogawa, Q.X. Guo, Bandtail characteristics in InN thin films, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002) 2063.
- [22] F. Urbach, The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids, *Phys. Rev.* 92 (1953) 1324.
- [23] C. W. Greeff and H. R. Glyde, Anomalous Urbach tail in GaAs, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 1778.
- [24] Manuel Cardona and D. L. Greenaway, Optical Properties and Band Structure of Group IV-VI and Group V Materials, *Phys. Rev.* 133 (1964) A1685.
- [25] K.S. Upadhyaya, M. Yadav, G.K. Upadhyaya, Lattice Dynamics of IV-VI Ionic Semiconductors: An Application to Lead Chalcogenides, *physica status solidi (b)* 229 (2006) 31129.
- [26] J. Chen, W. Z. Shen, Raman study of phonon modes and disorder effects in $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ alloys grown by molecular beam epitaxy, *J. Appl. Phys.* 99 (2006) 013513.
- [27] YANG Ai-Ling, WU Hui-Zhen, LI Zhi-Feng, QIU Dong-Jiang, CHANG Yong, LI Jian-Feng, P. J. McCann, X. M. Fang, Raman Scattering Study of PbSe Grown on (111) BaF_2 Substrate, *CHIN. PHYS. LETT.* 17 (2000) 606.
- [28] U.Schlichting, K.H.Gobrecht, The mobility of free carriers in PbSe crystals, *J.Phys.Chem.Sol.* 34 (1973) 753.
- [29] R. S. Allgaier and W. W. Scanlon, Mobility of Electrons and Holes in PbS, PbSe, and PbTe between Room Temperature and 4.2°K, *Phys. Rev.* 111(1958)1029 .
- [30] 桂永胜, 碲镉汞多载流子体系的磁输运特性研究 (中国科学院上海技术物理研究所博士学位论文), 1997.
- [31] J. R. Meyer, C. A. Hoffman, J. Antoszewski, and L. Faraone, Quantitative mobility spectrum analysis of multicarrier conduction in semiconductors, *J. Appl. Phys.* 81 (1997) 709.

第三章 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器的增益研究

3.1 前言

IV-VI 族铅盐半导体及其合金（比如 PbSe、PbTe、PbSnTe、PbSrSe、PbEuTe 和 PbEuSeTe 等）在中红外半导体激光器方面有着广泛的应用。^[1, 2] 这类材料的导带和价带极值均位于布里渊区 L 点, 通过调节 IV-VI 族铅盐的三元或四元合金组分, 其带隙对应的光子波长可以在 $3\text{--}30\mu\text{m}$ 范围内变化。因为铅盐半导体缺少重空穴带, 所以相比于 III-V 族和 II-VI 族半导体材料, 它们具有较小的 Auger 复合率。^[3] 同时, 当 IV-VI 族量子阱材料沿 $[111]$ 方向生长时, 四重简并的 L 能谷发生分裂, 使得其中一个能谷的跃迁能量低于其他三个能谷, 从而比较容易实现粒子数反转。相比于量子级联激光器^[4] 和 II 型量子阱激光器^[5], 上述特性是 IV-VI 族铅盐做为中红外激光器材料的优点。

基于 PbSe 材料的中红外激光器已经被广泛研究。^[3, 6-10] 由 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 体系制备的双异质结 (DH) 中红外激光器已经实现最高工作温度在 169 K 的连续波工作模式和最高工作温度在 290 K 的脉冲工作模式。^[6] 近期, 铅盐 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 多量子阱垂直腔表面发射激光器 (VCSELs) 实现了激射波长在 $4\mu\text{m}$ 附近的室温脉冲发射^[7] 和最高工作温度为 230 K 的连续波工作模式^[3]。相比于体材料, 量子阱的引入减少了载流子的一个自由度, 改变了 k 空间的能带结构, 极大的提高了半导体激光器的性能。从以上这个角度来看, 量子阱激光器比体材料制备的激光器有更好的表现。但对于 IV-VI 族材料量子阱激光器, 还面临着一系列挑战, 比如实现室温下的连续工作模式, 实现较低的阈值电流和高的输出功率, 以及较广泛的激射波长范围。因此, 有必要对 IV-VI 族材料量子阱激光器的增益性质进行全面细致的研究。本章中, 首先在 $k\cdot p$ 微扰方法的 Kane's 模型理论框架下推导了 IV-VI 族材料带间跃迁动量矩阵元和约化态密度的表达式。计算时所采用的增益表达式基于带间跃迁的费米黄金律, 且忽略了带间弛豫过程。通过计算, 得到了 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱增益随阱结构参数以及温度等因素的变化情况。其中阱结构参数包括量子阱的生长方向、阱宽和量

子阱势垒材料的组分。

3.2 激光器原理与光学增益

激光器实质上是受激辐射光放大发射器。按原子的量子理论,光和原子的相互作用包括受激吸收、自发辐射和受激辐射三种过程。

1. 受激吸收: 设原子的两个能级为 E_v 和 E_c , 并且 $E_c > E_v$ 。当能量为 $h\nu = E_c - E_v$ 的光子照射原子时, 原子就有可能吸收这个光子的能量, 从低能级 E_v 跃迁到高能级 E_c , 这个过程称为光的吸收, 又称为受激吸收。
2. 自发辐射: 原子受激后处于高能级 E_c 的状态是不稳定的, 一般只能停留 10^{-8} s 左右。在没有外界影响的情况下原子会自动返回到低能级 E_v 的状态, 同时向外辐射一个能量为 $h\nu = E_c - E_v$ 的光子。原子这种自发地从高能级返回到低能级并放出光子的过程为自发辐射。此时, 每一个原子的跃迁都是自发地、独立的进行的, 与外界作用无关; 所发出的光的振动方向、相位不一定相同, 属于非相干光。
3. 受激辐射: 如果处于高能级 E_c 状态的原子在自发辐射之前, 受到能量为 $h\nu = E_c - E_v$ 的光子的作用, 就有可能从高能级的 E_c 状态向低能级 E_v 状态跃迁, 并且向外辐射一个光子。因外来光子的刺激而从高能级状态向低能级状态跃迁并辐射光子的过程, 称为受激辐射。受激辐射必须有外来光子的刺激才会发生, 且外来光子的频率必须满足 $h\nu = E_c - E_v$ 的条件; 尤为重要是受激辐射出的光子与外来光子在频率、发射方向、相位及偏振状态等方面完全相同, 属于相干光。在受激辐射过程中, 通过一个光子的作用可以得到两个完全相同的光子; 这两个光子再引起其他原子产生受激辐射, 产生四个完全相同的光子; 以此类推, 就能在一个入射光子的作用下, 获得大量的状态完全相同的光子, 即形成了光放大。激光光束的一些特性主要就是来源于大量光子的相干性。

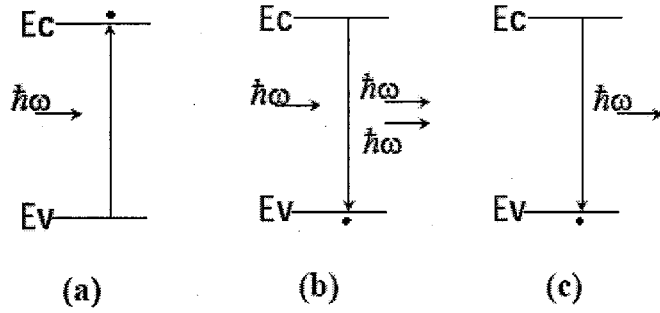


图 3-1 光和原子的相互作用。(a) 受激吸收, (b) 受激发射, (c) 自发发射

激光增益表达式的推导基于带间跃迁的费米黄金律。设光沿 x 方向传播, 光通量为 Φ , 如果入射光引起的电子从导带跃迁到价带的跃迁速率 $W_{c \rightarrow v}$ (跃迁速率是指单位时间单位体积跃迁的电子数) 大于电子从价带跃迁到导带的跃迁速率 $W_{v \rightarrow c}$, 入射光将被放大。光通量沿 x 方向单位长度的增加量为

$$\frac{d\Phi}{dx} = W_{c \rightarrow v} - W_{v \rightarrow c} \quad (3-1)$$

材料的光增益 g 定义为单位长度所产生的附加光子通量 $d\Phi/dx$ 与总光子通量之比, 即

$$g = \frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dx} = \frac{W_{c \rightarrow v} - W_{v \rightarrow c}}{\Phi} \quad (3-2)$$

由上式可以得到光通量随传输位置的变化为

$$\Phi = \Phi_0 \exp(gx) \quad (3-3)$$

当 $g > 0$ 时, 光被放大; 当 $g < 0$ 时, 光被衰减吸收。光通量 Φ 可表示为通过单位面积的光子密度, 即

$$\Phi = \frac{1}{2\hbar\omega} |\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*| = \frac{n_r \epsilon_0 c |\mathbf{E}_0|^2}{2\hbar\omega} \quad (3-4)$$

其中 E_0 是电矢量 $\mathbf{E}$ 的振幅, n_r 是材料的折射率, c 是真空光速, ϵ_0 是真空介电常数, ω 为光波频率。在频率为 $\hbar\omega = E$ 的光作用下电子从导带向价带的跃迁速率 $W_{c \rightarrow v}$ 和电子从价带向导带的跃迁几率 $W_{v \rightarrow c}$ 可由量子力学的微扰理论求得

$$W_{c \rightarrow v}(E) = \frac{\pi}{2\hbar} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\omega} \right)^2 |M_T|^2 \rho_{red}(E) f_c(E) [1 - f_v(E)] \quad (3-5)$$

$$W_{v \rightarrow c}(E) = \frac{\pi}{2\hbar} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\omega} \right)^2 |M_T|^2 \rho_{red}(E) f_v(E) [1 - f_c(E)]$$

其中 E 是跃迁导带态与价带态的能量差, M_T 是带间跃迁动量矩阵元, ρ_{red} 是约化态密度, f_c 和 f_v 分别是导带和价带电子的 Fermi-Dirac 分布函数。由上两式得

$$W_{c \rightarrow v}(E) - W_{v \rightarrow c}(E) = \frac{\pi}{2\hbar} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\omega} \right)^2 |M_T|^2 \rho_{red}(E) [f_c(E) - f_v(E)] \quad (3-6)$$

将式 (3-4) 和 (3-6) 代入式 (3-2) 得到光增益的表示式为

$$g(E) = \frac{\pi e^2 \hbar \rho_{red}(E) M_T^2}{\epsilon_0 n_r c m_0^2 E} [f_c(E) - f_v(E)] \quad (3-7)$$

对于量子阱体系, 上式可以表示为^[11]

$$g(E) = \frac{\pi e^2 \hbar \rho_{red}(E) M_T^2}{\epsilon_0 n_r c m_0^2 w E} [f_c(E) - f_v(E)] \quad (3-8)$$

其中, ρ_{red} 是量子阱的二维约化态密度, w 是阱宽, E 是光子在导带和价带之间跃迁的能量, H 是 Heaviside 函数, $e_{n, c}$ 和 $e_{n, v}$ 分别是量子阱中电子和空穴的 n th 量子能级。在本文中只考虑 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱基态跃迁的情况, 即 $n = 1$ 的情况。 f_c 和 f_v 可以通过计算注入的电子和空穴浓度决定。从而可以获得增益-载流子浓度关系。从计算增益的公式还可以看出在我们的计算中忽略了带间弛豫过程。自发辐射率 R_{sp} 通过下式给出

$$R_{sp}(E) = W_{c \rightarrow v}(E) = \frac{e^2 n_r E \rho_{red}(E) M_T^2}{\pi m_0^2 \epsilon_0 \hbar^2 c^3 w} f_c(E) [1 - f_v(E)] \quad (3-9)$$

自发辐射电流密度 j 利用下式得到

$$j = ew \int R_{sp}(E) dE \quad (3-10)$$

在激光器工作时, 当注入电流密度超过自发辐射和非辐射复合过程 (比如 Auger 复合或与缺陷有关的非辐射复合过程) 时激光器才有可能实现受激辐射。在材料质量不是很差的情况下, 自发辐射要比非辐射复合过程强烈。因此, 增益-自发辐射电流密度关系在一定程度上可以用来评估量子阱激光器的阈值特性。

3.3 IV-VI 族材料的约化态密度和带间跃迁矩阵元的计算

对于 IV-VI 体材料,其带边能带结构一般是利用 $k \cdot p$ 微扰方法框架下的 Kane's 模型进行求解。^[12] $k \cdot p$ 微扰方法是一种研究半导体材料带边色散关系的经验型能带计算方法,而 Kane's 模型经常用于研究窄禁带半导体材料。如前所述,IV-VI 材料的带隙为于 k 空间的 L 点,由于 L 点的对称性,这类材料属于多能谷半导体。IV-VI 半导体材料缺少重空穴带,导带和价带在考虑自旋的情况下均是两重简并的。如果忽略自由电子动能项和远带的贡献, Kane's 模型 $k \cdot p$ 微扰哈密顿可以表示为

$$H = \begin{pmatrix} \frac{E_g}{2} - E & 0 & \frac{\hbar}{m_0} p_t k_t & \frac{\hbar}{m_0} p_l k_l \\ 0 & \frac{E_g}{2} - E & \frac{\hbar}{m_0} p_l k_l & -\frac{\hbar}{m_0} p_t k_t \\ \frac{\hbar}{m_0} p_l k_l & \frac{\hbar}{m_0} p_t k_t & -\frac{E_g}{2} - E & 0 \\ \frac{\hbar}{m_0} p_t k_t & -\frac{\hbar}{m_0} p_l k_l & 0 & -\frac{E_g}{2} - E \end{pmatrix} \quad (3-11)$$

其中, E_g 是 L 点带隙, k_t 和 k_l 分别是横向和径向波矢, p_t 和 p_l 是相应的横向和径向动量矩阵元。经过计算,带边的色散关系可以表示为^[12]

$$E_{c,v} = -\frac{1}{2}E_g \pm \sqrt{\frac{1}{4}E_g^2 + \frac{\hbar^2}{m_0^2}(p_t^2 k_t^2 + p_l^2 k_l^2)} \quad (3-12)$$

在这里能量零点设在导带底。以 $[111]$ 方向为径向方向。公式(3-12)体现了 IV-VI 铅盐 L 点椭球等能面的各向异性和非抛物线性。对于 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱,公式(3-8)中的约化态密度 ρ_{red} 和带间跃迁矩阵元 M_T 可以精确求解。将计算 IV-VI 体材料态密度的解析方法^[13]推广到二维体系,可以得到 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱的约化态密度 ρ_{red} , 导带和价带的态密度 $\rho_{c(v)}$ 分别为

$$\rho_{\text{red}}(E) = \frac{\sqrt{m_x^* m_y^*}}{2\pi \hbar^2 E_g} \cdot E \cdot \sum_{n=1}^{\infty} H[E - (e_{n,c} - e_{n,v})] \quad (3-13)$$

$$\rho_{c(v)}(E_{c(v)}) = \frac{\sqrt{m_x^* m_y^*}}{\pi \hbar^2 E_g} \cdot (2E_{c(v)} + E_g) \cdot \sum_{n=1}^{\infty} H[E_{c(v)} - (e_{n,c} - e_{n,v})] \quad (3-14)$$

其中 m_x^* 和 m_y^* 是每个椭球能谷在量子阱结平面的两个有效质量，在量子阱中，带间跃迁矩阵元 M_T 可以表示为 $M_T^2 = I^2 M^2$ ，其中， I 是量子阱在生长方向的电子和空穴包络函数的重叠积分。 M^2 是带边 Bloch 态之间的动量矩阵元的平方^[13]，其可以表示为

$$M^2 = \sum_{i,j=\uparrow\downarrow} \left| \langle C_i | \vec{e} \cdot \vec{p}_{cv}(0) | V_j \rangle \right|^2 \quad (3-15)$$

其中 $\langle C_i |$ 和 $| V_j \rangle$ 分别为导带和价带 Bloch 波函数， i 和 j 分别代表自旋向上和向下， $\vec{e}$ 为非偏振光的偏振矢量。IV-VI 量子阱已经成功的实现了在 $\langle 111 \rangle$ 、 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$ 的生长。^[11, 14, 15] 对于沿 $[111]$ 方向生长的量子阱，四个等价简并能谷发生部分消除，其中一个能谷为径向，另外三个为仍然简并的斜谷。对于沿 $[100]$ 方向生长的量子阱，四个简并能谷均为斜谷。对于沿 $[110]$ 方向生长的量子阱，四个能谷分为两组，两两简并。通过计算可以得到了在上述三种生长方向上五种类能谷的 Bloch 波函数的对于 TE 模的带间跃迁矩阵元 M^2 ，如下表 3-1 所示。表中还列出了文献上对于不同量子阱生长方向下各类能谷的在量子阱生长方向 m_z^* 和结平面内的有效质量 m_x^* 和 m_y^* 。^[16] 通过求解有限方势阱的 Schrödinger 方程可以得到 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱中在其生长方向上的量子化能级和电子空穴的包络函数。由于这类材料具有高介电常数，因此量子阱中的激子效应和能带弯曲现象可以忽略。由于 IV-VI 族材料的电子和空穴的有效质量很接近，在不考虑远带的情况下可以认为导带和价带是镜面对称的。因此在此近似带阶 $\Delta E_c/\Delta E_v$ 为 1。约化态密度 ρ_{red} 、注入的电子和空穴浓度、带边 Bloch 态之间的动量矩阵元 M 和量子阱在生长方向的电子和空穴包络函数的重叠积分 I 的具体计算方法分别附在论文正文后面的附录 A、B、C 和 D 中。

表 3-1 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱沿不同生长方向生长时各类能谷的有效质量和带边 Bloch 态之间的动量矩阵元的平方

Growth direction	m_x^*	m_y^*	m_z^*	degeneracy	M^2
$\langle 111 \rangle$	m_t	m_t	m_l	1	$2p_t^2$
	m_t	$(m_t+8m_l)/9$	$9m_t m_l / (m_t+8m_l)$	3	$(10p_t^2+8p_l^2)/3$

<100>	m_t	$(m_t+2m_l)/3$	$3m_tm_l/(m_t+2m_l)$	4	$(16p_t^2+8p_l^2)/3$
<110>	m_t	$(2m_t+m_l)/3$	$3m_tm_l/(2m_t+m_l)$	2	$(10p_t^2+2p_l^2)/3$
	m_t	m_l	m_t	2	$2(p_t^2+p_l^2)$

3.4 增益计算结果和讨论

PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱体系由于其中红外激光器方面的应用而得到广泛研究。^[7-10, 17] PbSe 和 Pb_{1-x}Sr_xSe 这两种材料之间物理性质接近, Sr 元素的加入使得 Pb_{1-x}Sr_xSe 材料的禁带宽度大于 PbSe 的禁带宽度, Pb_{1-x}Sr_xSe 的带隙与 Sr 组分和温度的关系可以表示为^[18]

$$E_g(x, T) = 0.150 + 3.608x - 1.314x^2 + (0.430 - 3.093x + 6.495x^2) \times 10^{-3}T (eV) \quad (3-16)$$

其中 $0 \leq x < 0.276$, $0 < T \leq 350K$ 。在计算过程中用到的其他材料参数列于表 3-2。在本文中主要研究的是 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 单量子阱。激光器的增益和阈值性质与模式增益有直接关系。而模式增益是材料的光学增益与光学限域因子的乘积。因为光学限制因子是由激光器的结构决定的, 为了提高模式增益, 人们设计了多种量子阱激光器的结构, 比如 separate-confinement hetero-structure (SCH) 单量子阱或多量子阱结构。在本节中, 着重讨论单量子阱的增益, 这是分析其他各种量子阱结构的基础。图 3-2 给出了计算得到的 77 K 时[111]方向生长的阱宽为 15 nm 的 PbSe/Pb_{0.8}Sr_{0.2}Se 量子阱径向能谷的增益和自发辐射谱, 其中注入载流子浓度为 $1.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 。

表 3-2 计算 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱增益时用到的材料参数

parameters	$2p_l^2/m_0$ (eV)	$2p_t^2/m_0$ (eV)	m_l^*/m_0	m_t^*/m_0	n_r (77K)	dn_r/dt (K ⁻¹)
values	1.7 ^a	3.0 ^a	0.07 ^b	0.04 ^b	5	0.00082 ^c

^a 取自参考文献[19]

^b 取自参考文献[12]

^c 取自参考文献[9]

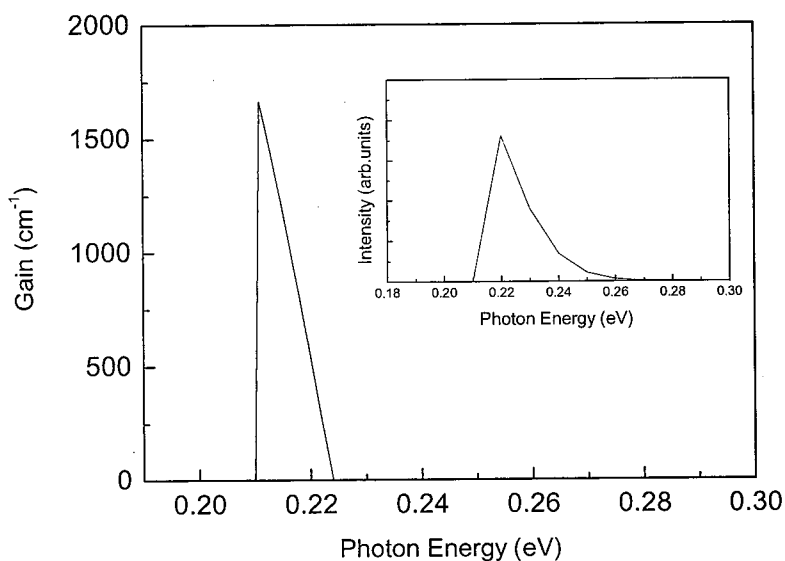


图 3-2 77 K 时 [111] 方向生长的阱宽为 15 nm 的 PbSe/Pb_{0.8}Sr_{0.2}Se 量子阱径向能谷的增益和自发辐射谱, 注入载流子浓度为 $1.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

3.4.1 不同生长方向的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光增益

利用表 3-1 中的不同生长方向的有效质量和带间跃迁矩阵元, 计算得到了分别沿[111]、[100]和[110]方向生长的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱在 77 K 时峰值增益(a) 峰值增益-载流子浓度关系;(b)峰值增益-电流密度关系。从图 3-3 中可以看出, 当量子阱沿[111]方向生长时, 其沿生长方向的径向能谷具有最小的透明载流子浓度 N_{th} 和辐射电流密度 J_{th} , 沿[100]方向生长时, 其四个简并斜谷具有最大的饱和增益 g_{sat} 。从图 3-3 中还可以看出, 相比于其他类型的能谷, [110]方向生长的量子阱中的 a 类能谷在载流子浓度 2.5 到 $6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 之间具有较小的阈值载流子浓度和较高的饱和增益。与上述类似的结论已有文献报道^[15], 此文献中利用体材料的动量矩阵元和态密度计算了 PbSe 量子阱沿不同方向生长时的增益情况。 N_{th} 在不同类型的能谷之间的差异主要是因为约化态密度 ρ_{red} 之间的差异。具有较小 ρ_{red} 的能谷越容易实现粒子数反转, 其 N_{th} 也较小。而饱和增益 g_{sat} 的在不同类型能谷之间的差异主要源于每类能谷的带间跃迁矩阵元 M_{T} 的差异。较大的 M_{T} 对应较大的带间跃迁几率和较大的 g_{sat} 。从我们的计算结果来看, 量子阱沿[111]方向生长时, 其沿生长方向的径向能谷具有最小的约化态密度 ρ_{red} 和

最小的带间跃迁矩阵元 M_T 。而量子阱沿[100]方向生长时, 其能谷具有最大的约化态密度 ρ_{red} 和最大的带间跃迁矩阵元 M_T 。至于峰值增益-电流密度关系, J_{th} 随能谷类型的变化规律与 N_{th} 的不尽相同。这主要表现在[111]方向生长的量子阱的倾斜能谷的 J_{th} 略大于[100]方向生长的量子阱的倾斜能谷的 J_{th} 。通过计算发现, 相比于量子阱沿[100]方向生长时的倾斜能谷, 量子阱沿[111]方向生长时的倾斜能谷具有较大的量子化能级 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,c}$, 而较大的 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,c}$ 对于 J_{th} 的增加作用大于对 N_{th} 的增加作用。因此, [111]方向生长的量子阱的倾斜能谷的 J_{th} 略大于[100]方向生长的量子阱的倾斜能谷的 J_{th} 。由于量子化能级 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,c}$ 在注入电子和空穴浓度和注入电流密度 j 公式中的存在形式比较复杂, 所以不能直观的理解 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,c}$ 对于 J_{th} 和 N_{th} 的不同作用效果。另外需要指出的是, 当量子阱沿某一方向生长时, 其增益是所有四个能谷之和, 而图 3-3 中只给出了每类能谷的增益情况。

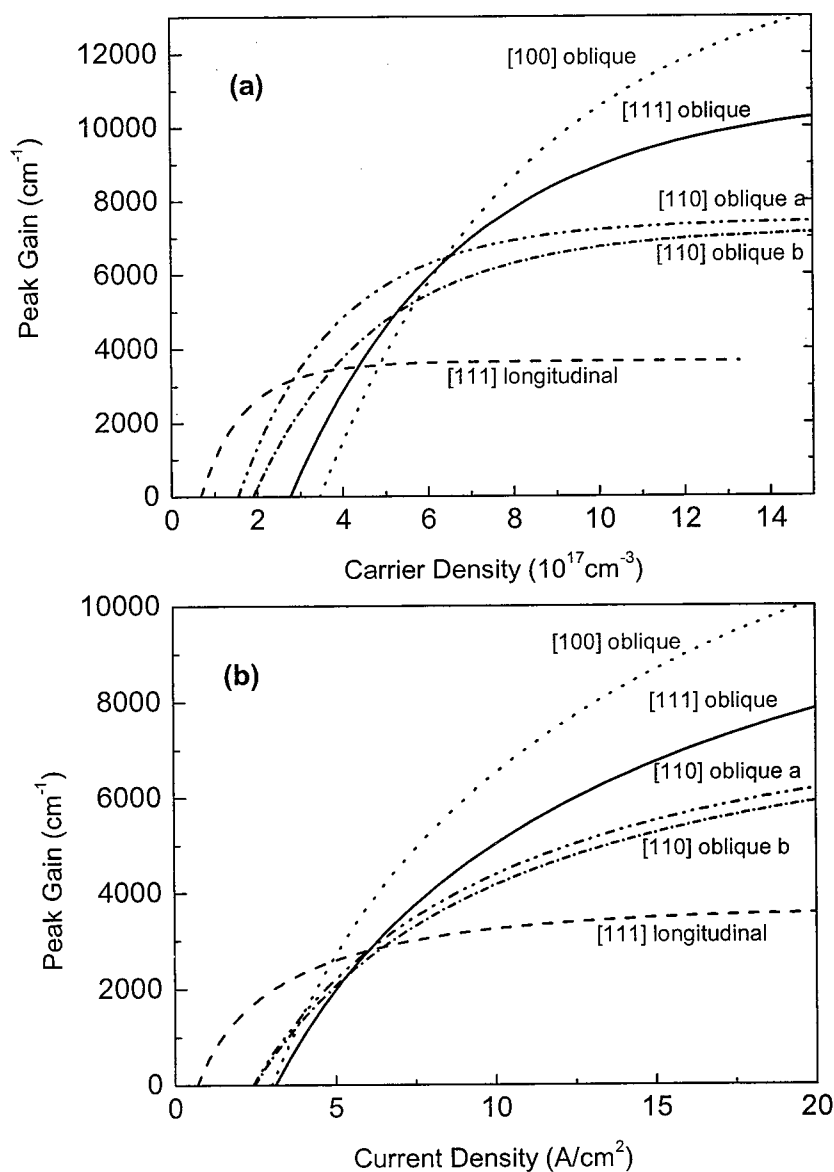


图 3-3 分别沿[111]、[100]和[110]方向生长的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器在 77 K 时各类能谷的峰值增益。(a) 峰值增益-载流子浓度关系；(b) 峰值增益-电流密度关系

3.4.2 不同阱宽的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器增益

在下文，分别讨论 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器在不同阱宽、势垒 Sr 组分和温度时的增益情况。在此仅讨论沿[111]方向的径向能谷的情况。图 3-4 给出了不同阱宽时的增益情况。对于阱宽较大的量子阱，透明载流子浓度 N_{th} 和透明

辐射电流密度 J_{th} 较小, 饱和增益 g_{sat} 较小。透明载流子浓度 N_{th} 和透明辐射电流密度 J_{th} 随阱宽的变化规律可以从量子阱的三维约化态密度 (ρ_{red}/w) 的角度来考虑, 阱宽的增加降低了三维约化态密度。因此比较容易实现集居数反转, 降低了 N_{th} 和 J_{th} 。当 $\rho_{red}(f_c - f_v)/w$ 趋于饱和时, 增益达到饱和。从这个角度可以理解随阱宽变大饱和增益下降的现象。另外, 阱宽的变化可以引起阱中量子化能级的改变, 使得激光器的激射波长发生改变。

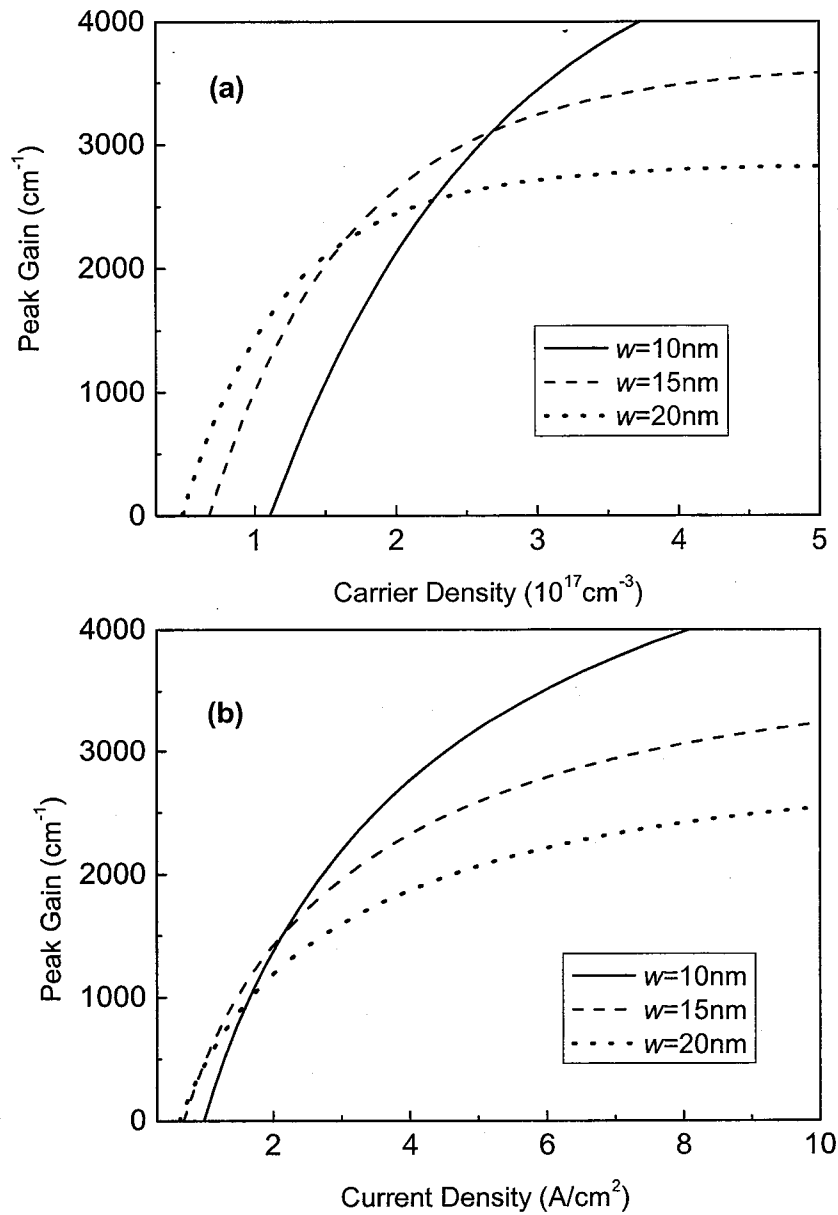


图 3-4 沿 [111] 方向生长的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器 77 K 时

在不同量子阱宽度时峰值增益. 阱宽分别为 10、15 和 20 nm. (a)峰值增益-载流子浓度关系; (b)峰值增益-电流密度关系

3.4.3 Sr 组分发生改变时的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器增益

当势垒材料 Pb_{1-x}Sr_xSe 中 Sr 组分发生改变时, 一方面, Sr 组分的增加引起量子阱的势垒高度增加, 因此导致量子阱中的量子化能级 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,v}$, 以及阱中电子和空穴的包络函数的重叠积分 I 增加. 另一方面与 PbSe 量子阱中的应变有关. PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 体系存在着晶格失配, 其中 PbSe 的晶格常数为 0.6126 nm, SrSe 的为 0.6243 nm, 因此在阱材料 PbSe 中存在着张应变而垒材料 Pb_{1-x}Sr_xSe 中存在着压应变. 又因为 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 体系的晶格失配度较小, 当 Pb_{1-x}Sr_xSe 的 $x = 0.25$ 时, PbSe 材料的应力为 0.5%. 因此在这里可以认为这个体系中的应力没有释放.^[20] 依照形变势理论, 应变将导致带隙发生改变. 对于沿[111]方向的径向能谷, PbSe 带隙的改变可以通过下式得到

$$\Delta E_g = D_d(2\varepsilon_p + \varepsilon_\perp) + D_u\varepsilon_\perp, \quad (3-17)$$

其中 D_d 和 D_u 分别是剪切 (dilatation) 和单轴 (uniaxial) 形变势, ε_p 和 $\varepsilon_\perp$ 分别是面内各向同性应变和垂直应变, 它们可以表示为

$$\varepsilon_p = \frac{a_2 - a_1}{a_1}, \quad (3-18)$$

$$\varepsilon_\perp = -2 \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \varepsilon_p, \quad (3-19)$$

其中 a_1 和 a_2 分别是 PbSe 和 Pb_{1-x}Sr_xSe 的晶格常数; C_{11} , C_{12} , 和 C_{44} 是弹性常数, 计算中使用的形变势和弹性常数的数值分别从参考文献[20]和[21]得到。

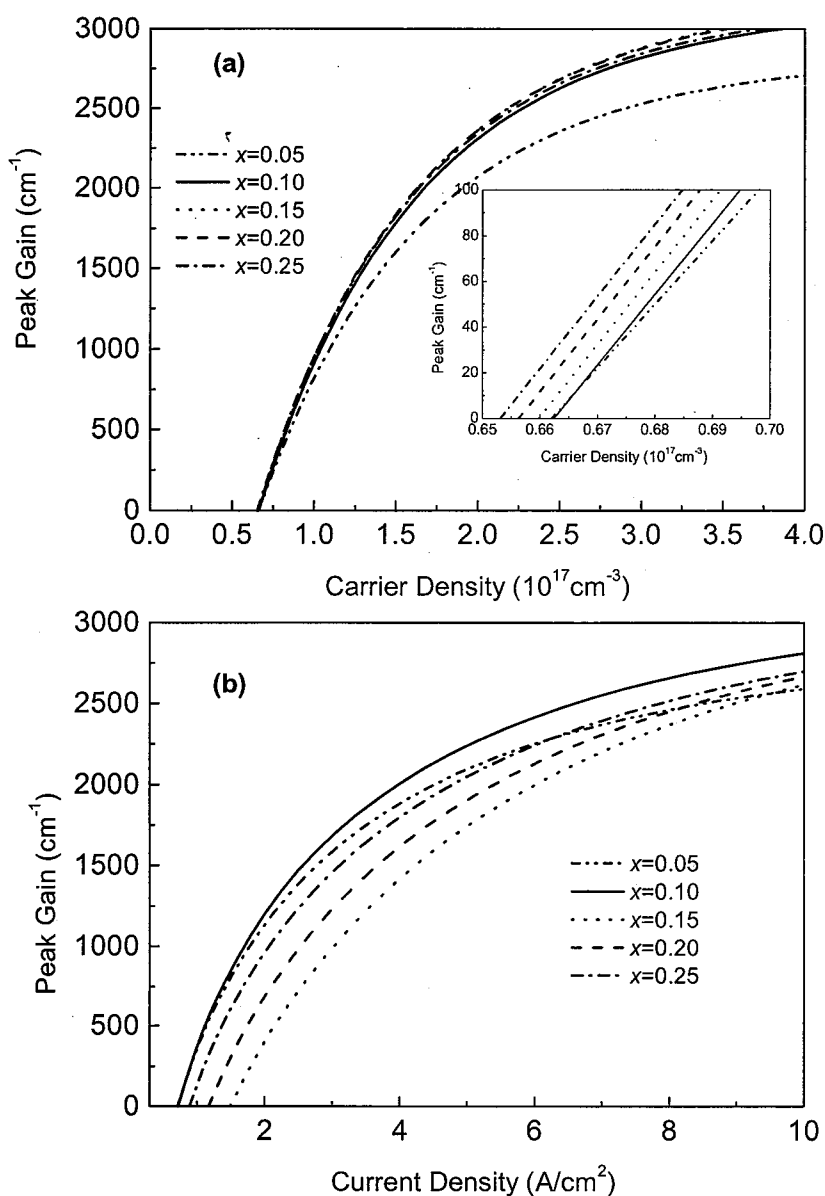


图 3-5 沿 [111] 方向生长的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器 77 K 时在不同 Pb_{1-x}Sr_xSe 势垒 Sr 组分时的峰值增益. Sr 组分的变化从 0.05 到 0.25.(a)峰值增益-载流子浓度关系; (b)峰值增益-电流密度关系

图 3-5 为沿[111]方向生长的不同 Pb_{1-x}Sr_xSe 势垒 Sr 组分的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器 77 K 时的峰值增益情况. Sr 组分的变化从 0.05 到 0.25. (a)峰值增益-载流子浓度关系; (b)峰值增益-电流密度关系. 从图 3-5(a)可以看出, 在 $x = 0.1$ 到 $x = 0.25$ 范围内, 透明载流子浓度 N_{th} 随着 x 的增加而减小, 然而 $x = 0.05$

的 N_{th} 却小于 $x = 0.1$ 的。至于饱和增益 g_{sat} , 它随 x 的增加而增加。为了解释这种现象, 通过调整由 Sr 组分不同而导致变化的量子阱参数来计算增益情况。其中, 有效质量和 Bloch 波函数的带间跃迁矩阵元认为不随 Sr 组分变化。通过计算发现, E_g 的增加使得 N_{th} 和 g_{sat} 减小, 这主要是因为 E_g 的增加减小了 ρ_{red} 。 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,v}$ 的增加使 N_{th} 增加而使 g_{sat} 减小, 包络函数 I 的改变不影响 N_{th} , 但它的增加可以使 g_{sat} 变大。因此, 可以认为在 $x = 0.1$ 到 $x = 0.25$ 范围内, N_{th} 随着 x 的增加而减小主要是因为 E_g 的增加, 而 $x = 0.05$ 的 N_{th} 略微小于 $x = 0.1$ 的 N_{th} 的现象主要是因为 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,v}$ 的增加造成的影响超过了 E_g 增加对 N_{th} 的影响。饱和增益 g_{sat} 随 x 的增加而增加主要是因为包络函数的积分 I , 而 E_g 、 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,v}$ 对 g_{sat} 的影响并不显著。对于峰值增益-辐射电流密度的关系采用了同样的分析方法。 E_g 、 $e_{n,c}$ 和 $e_{n,v}$ 影响透明辐射电流密度 J_{th} 的规律与它们影响 N_{th} 的情况相同, 只不过包络函数 I 的增加可以增加 J_{th} 。从图 3-5 (b) 可以看出透明辐射电流密度 J_{th} 和饱和增益 g_{sat} 随着 x 的增加的变化都不是单调的, 这源于各个影响因素的综合作用。因此, 在激光器应用中, 通过调节 Sr 组分 x 就可以实现在一定的注入电流密度范围内实现较小的 J_{th} 和较大的 g_{sat} 。从我们的结果来看, $x = 0.1$ 时有利于实现较小的 J_{th} 和较大的 g_{sat} 。

3.4.4 不同温度下 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器增益

由于 IV-VI 族材料比其他材料具有较低的热导率, 并且室温连续波工作的 IV-VI 激光器还没有实现, 因此在此讨论 PbSe/PbSrSe 量子阱激光器的增益随温度的变化情况。在计算过程中用到的 PbSe 和 Pb_{1-x}Sr_xSe 的带隙随温度的变化规律由公式 (3-16) 决定, PbSe 材料的折射率的温度系数为 $8.2 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, 列在表 3-2 中。有效质量 m^* 和 Bloch 波函数的带间跃迁矩阵元的平方 M_T^2 被认为与温度无关。如图 3-6 所示, 随着温度的升高透明载流子密度 N_{th} 和电流密度 J_{th} 变大, 但饱和增益 g_{sat} 随着温度的升高而降低。 N_{th} 和 J_{th} 随温度的增加而增加主要是由于准费米分布函数 f_c 和 f_v 随温度的变化。另外, 随温度升高而增加的 n_r 也会使 J_{th} 增加。 g_{sat} 随温度的升高而下降是由于不断增加的 E_g 、 n_r 和 T 。最近关于 PbSe 的一种三元合金 PbMnSe 的变温透射光谱研究表明, Bloch 态波函数的带间跃迁矩阵元的平方 p_l^2 和 p_l^2 是随着温度的升高而降低的。^[22] 因此, 类比

PbMnSe 的情况, 在此可以认为 PbSe 的 Bloch 态波函数的带间跃迁矩阵元的平方 p_t^2 和 p_l^2 也是随着温度的升高而降低的, 并且认为 $2p_t^2/m_0$ 和 $2p_l^2/m_0$ 的温度系数为 -0.004 eV/K 。计算结果也显示在图 3-6 中。从图中可以看出, 当考虑到动量矩阵元随温度的变化后, 随着矩阵元的减小在一个确定的载流子浓度下饱和增益降低, 对于电流密度, 矩阵元的减小不但使饱和增益减小而且使透明电流密度 J_{th} 减小。

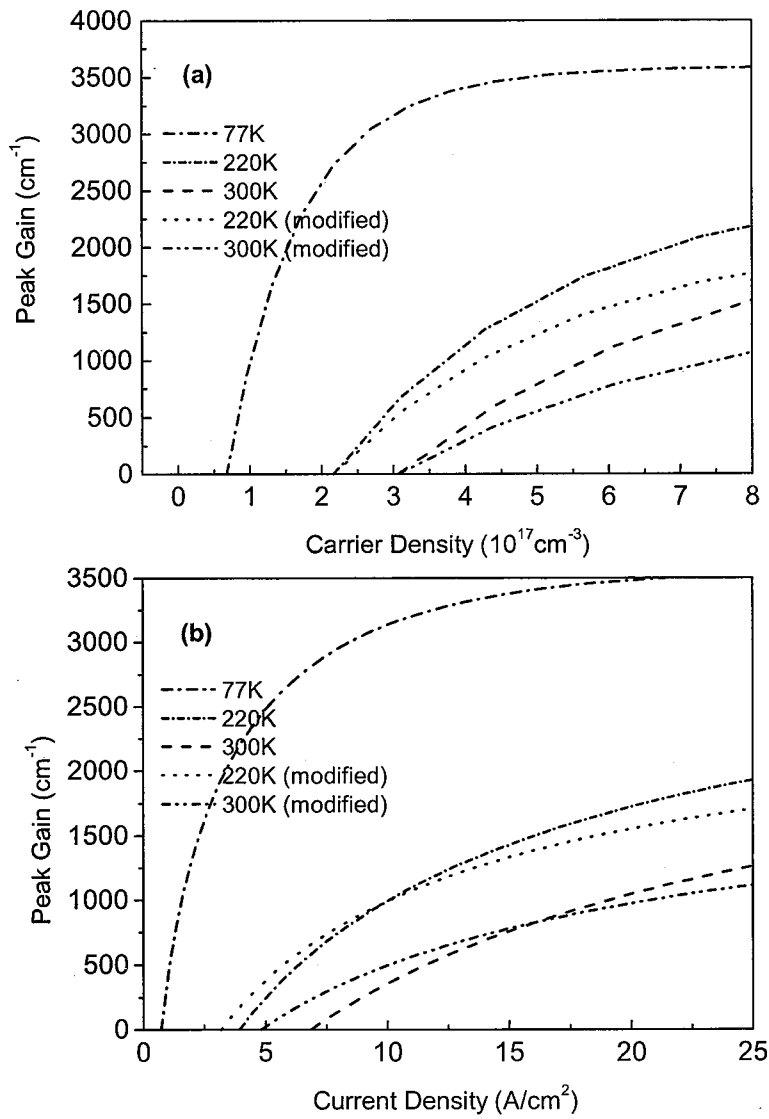


图 3-6 沿 [111] 方向生长的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱激光器在不同温度 $T = 77$ 、220 和 300 K 时的峰值增益。(a) 峰值增益-载流子浓度关系; (b) 峰值增益-电流密度关系. 考虑到动量矩阵元随温度变化

后经过修正的 220 K 和 300 K 的增益也在图中

3.5 本章小结

为了优化 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的性能, 本章对其增益性质进行了理论计算。在 Kane's 模型 $k \cdot p$ 微扰方法理论框架下推导了带间跃迁动量矩阵元和约化态密度。通过理论计算, 得到了 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱增益随阱结构参数以及温度等因素的变化情况。其中的阱结构参数包括量子阱的生长方向、阱宽和量子阱势垒材料的组分。

本章参考文献

- [1] D. L. Partin, Lead Salt Quantum Effect Structures, IEEE J. Quantum Electron. 24 (1988) 1716.
- [2] P.J. McCann, IV–VI Semiconductors for Mid-infrared Optoelectronic Devices Springer, Berlin, Heidelberg, 118 (2006) 237.
- [3] F. Zhao, H. Wu, A. Majumdar, and Z. Shi, Continuous wave optically pumped lead-salt mid-infrared quantum-well vertical-cavity surface-emitting lasers, Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 5133.
- [4] J. S. Yu, S. Slivken, A. Evans, J. David, and M. Razeghi, Very high average power at room temperature from $\lambda \approx 5.9 \mu\text{m}$ quantum-cascade lasers, Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 3397.
- [5] W. W. Bewley, C. L. Felix, I. Vurgaftman, D. W. Stokes, E. H. Aifer, L. J. Olafsen, J. R. Meyer, M. J. Yang, B. V. Shanabrook, H. Lee, R. U. Martinelli, and A. R. Sugg, Appl. Phys. Lett. High-temperature continuous-wave 3–6.1 μm "W" lasers with diamond-pressure-bond heat sinking, 74 (1999) 1075.
- [6] B. Spanger, U. Schiessl, A. Lambrecht, H. Böttner, and M. Tacke, Near-room-temperature operation of Pb_{1-x}Sr_xSe infrared diode lasers using molecular beam epitaxy growth techniques, Appl. Phys. Lett. 53 (1988) 2582.
- [7] F. Zhao, H. Wu, L. Jayasinghe, and Z. Shi, Above-room-temperature optically pumped 4.12 μm midinfrared vertical-cavity surface-emitting lasers, Appl. Phys. Lett. 80 (2002) 1129.
- [8] S. Khosravani and Z. Shi, Theoretical investigation of high temperature IV–VI compound continuous wave midinfrared vertical cavity surface emitting lasers, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 139.
- [9] F. Zhao, X. Lv, A. Majumdar, and Z. Shi, Influence of mounting on continuous-wave photoluminescence from midinfrared PbSrSe/PbSe multiple quantum wells, Appl. Phys. Lett. 84 (2004) 1251.
- [10] Z. Shi, M. Tacke, A. Lambrecht, and H. Böttner, Midinfrared lead salt

- multi-quantum-well diode lasers with 282 K operation, Appl. Phys. Lett. 66 (1995) 2537.
- [11] M. F. Khodr and P. J. McCann B. A. Mason, Gain and current-density calculation in IV–VI quantum well lasers, J. Appl. Phys. 77 (1995) 4927.
- [12] E. A. de Andrada e Silva, Optical transition energies for lead-salt semiconductor quantum wells, Phys. Rev. B 60 (1999) 8859.
- [13] S. Yuan, H. Krenn, G. Springholz, G. Bauer, Dispersion of absorption and refractive index of PbTe and $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ ($x < 0.05$) below and above the fundamental gap, Phys. Rev. B 47 (1993) 7213.
- [14] X. M. Fang, K. Namjou, I-Na Chao, and P. J. McCann N. Dai, G. Tor et al., Molecular beam epitaxy of PbSrSe and PbSe/PbSrSe multiple quantum well structures for use in midinfrared light emitting devices, J. Vac. Sci. Technol. B 18 (2000) 1720.
- [15] Z. Shi, X. Lv, F. Zhao, A. Majumdar, D. Ray, R. Singh, and X. J. Yan, [110] Orientated lead salt midinfrared lasers, Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 2999.
- [16] T. N. Xu, H. Z. Wu, J. X. Si, and P. J. McCann, Optical transitions in PbTe/CdTe quantum dots, Physical Review B 76 (2007) 155328.
- [17] F. Stern and W. E. Howard, Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit, Phys. Rev. 163 (1967) 816.
- [18] W. Z. Shen, H. F. Yang, L. F. Jiang, K. Wang, G. Yu, H. Z. Wu, and P. J. McCann, Band gaps, effective masses and refractive indices of PbSrSe thin films: Key properties for mid-infrared optoelectronic device applications, J. Appl. Phys. 91 (2002) 192.
- [19] G. Nimtz, B. Schlicht, Narrow-Gap Lead Salts, springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, (1983) p48.
- [20] Huizhen Wu, Ning Dai, and Patrick J. McCann, Experimental determination of deformation potentials and band nonparabolicity parameters for PbSe, Phys. Rev. B 66 (2002) 045303.
- [21] I. I. Zasavitskii, E. A. de Andrada e Silva, E. Abramof, and P. J. McCann, Optical deformation potentials for PbSe and PbTe, Phys. Rev. B 70 (2004)

115302.

- [22] Y.H. Sun, B. Zhang, N. Dai, J.X. Si, H.Z. Wu, R.J. Zhang, L.Y. Chen, Temperature-dependent optical properties of Pb_{1-x}Mn_xSe films epitaxially grown on Zn_{0.04}Cd_{0.96}Te substrates, Journal of Alloys and Compounds 468 (2009) 34.

第四章 激光束诱导光电流方法及其在 HgCdTe 光伏器件检测中的应用

应用

4.1 前言

目前, HgCdTe 红外探测器是最重要的红外探测器。^[1] 它具有许多众所周知的优点, 如量子效率高, 工作温度范围大, 通过组分调节, 其吸收波长几乎涵盖了所有红外区域的响应波长。HgCdTe 红外探测器正在向多色、高集成的红外焦平面阵列发展。但是目前制备高质量、大面积 HgCdTe 焦平面器件还存在许多困难, 使得焦平面器件成本也比较高。因此, 除了对材料的筛选和器件工艺的改进之外, 发展有效而简便的材料和器件检测手段是十分必要的。激光束诱导光电流 (laser-beam-induced currents, LBIC) 技术作为一种方便快捷的材料和器件检测方法, 它已经被用于研究 HgCdTe 材料的均匀性和缺陷^[2], 对 HgCdTe 探测器阵列的均匀性进行评估, 研究单个 pn 结的结参数^[3, 4]和器件工艺^[5]等。

本章首先介绍激光束诱导光电流方法的原理和实验装置。然后给出了对一些 HgCdTe 器件结构的测试结果, 并利用指数衰减模型从室温测得的 LBIC 信号中提取了结区外少子的扩散长度。对刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构进行了 300 K 和 83 K 温度下的 LBIC 测量和分析。在对 HgCdTe n-on-p 结线列进行变温 LBIC 测量过程中, LBIC 信号发生强烈变化, 从笔者目前掌握的知识还难以解释这种现象。基于半导体器件的漂移-扩散模型, 对上述变温 LBIC 结果进行了简单讨论。

4.2 激光束诱导光电流方法原理与实验装置

激光束诱导光电流 (LBIC)^[2]方法具有无损伤、高分辨、实施简单的特点, 是一种适合 HgCdTe 材料和器件的质量诊断技术。在利用 LBIC 方法测量样品的 LBIC 信号时, 一般在被测样品的两个远端制备两个欧姆电极。然后将低功率的聚焦激光束照射到样品表面区域。受到激光激发的样品产生电子空穴对, 电子空穴

对在局域电场的作用下发生定向移动就形成了光电流。随着激光斑在样品表面的扫描,就得到了光电流随激光束位置的函数关系,即 LBIC 信号。定性来说, LBIC 信号产生于被测量样品在激光光照下的横向光伏效应。^[6] 如图4-1所示,当聚焦激光照射在样品表面时,样品中光生电子和空穴边扩散边复合。一部分扩散到 pn 结横向结区的电子和空穴在结区内建电场的作用下分离,电子向n区运动,空穴向p区运动。如果 n 区的导电能力远大于 p 区,就可以近似认为n区为等势体。这样注入到n区的电子就使得整个 n 区的电势下降,破坏了pn结两边的热平衡状态,进而有电子从 n 区注入到 p 区。于是,在光照点附近的 p 区和其他 p 区部分之间由于电子和空穴分布的差异就会形成一个横向电场,从而形成了LBIC信号。

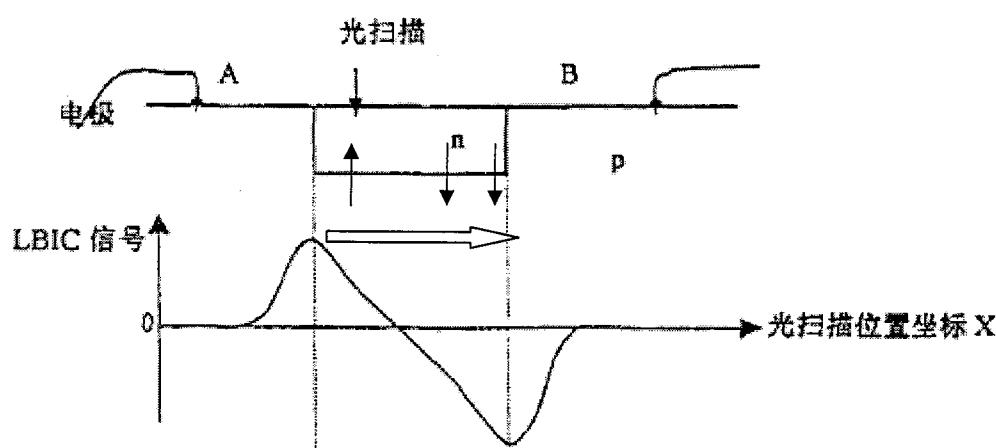


图 4-1 pn 结的 LBIC 信号产生原理. 其中的空心箭头为横向电场方向

图 4-2 是激光束诱导光电流 (LBIC) 方法所采用的实验装置的结构框图。LBIC 测试系统组件包括激光光源、激光显微系统、X-Y 移动平台及其驱动装置。波长为 632.8 nm 的 He-Ne 激光作为诱导光源。有不同聚焦程度的物镜可供选择。实验中所采用的均为 50 倍物镜,光斑尺寸约为 $1\ \mu\text{m}$,移动平台的走步精度可达 $0.1\ \mu\text{m}$ 。LBIC 的信号很弱,有时为皮安-纳安量级,因此需要采用锁相装置。斩波器采用 EG&G Model650 Series,最高斩波频率为 3000 Hz。锁相放大器采用 SR830 DSP lock-in amplifier,探测灵敏度为飞安 (fA),低温测量采用液氮制冷。

在进行 LBIC 测量过程中, 要注意对测量条件的严格控制。比如样品放置应该尽量保持水平, 防止激光在扫描过程中照射到样品表面的光斑尺寸发生大的漂移; 样品表面尽量光滑, 防止激光在样品表面发生漫反射和散射; 激光的功率选择要适当, 防止样品过热或信号太弱; 斩波器的斩波频率和锁相放大器的积分时间常数等参数也应根据实际情况进行调节。

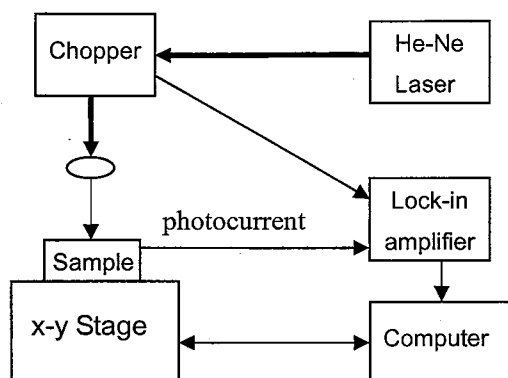


图 4-2 LBIC 测试系统

LBIC 实验所采用的 He-Ne 激光需要经过聚焦然后照射到样品表面。为了解聚焦激光光斑的大小, 做了如下实验和数据处理。激光经过 50 倍长焦镜头聚焦后扫描经过包含有半导体材料和金属的界面, 如图 4-3 中的上图所示。一般情况下, 半导体有 Raman 信号而金属没有 Raman 信号。如果激光光斑是无限小的, 则激光扫描经过半导体和金属材料后, 样品的 Raman 响应应该为台阶状, 如图 4-3 中的中图所示。但实际上, 激光光斑有一定的大小和能量分布, 因此实际测量的结果不会是台阶状, 而是如图 4-3 的下图所示。图 4-3 的下图所示 Raman 信号为样品实际的 Raman 信号与激光光斑能量分布的卷积。为了得到激光光斑的大小和能量分布情况就需要进行去卷积运算。去卷积后得到的聚焦激光光斑的能量分布如图 4-4。从中可以看到激光光斑直径约为 $1\ \mu\text{m}$ 。

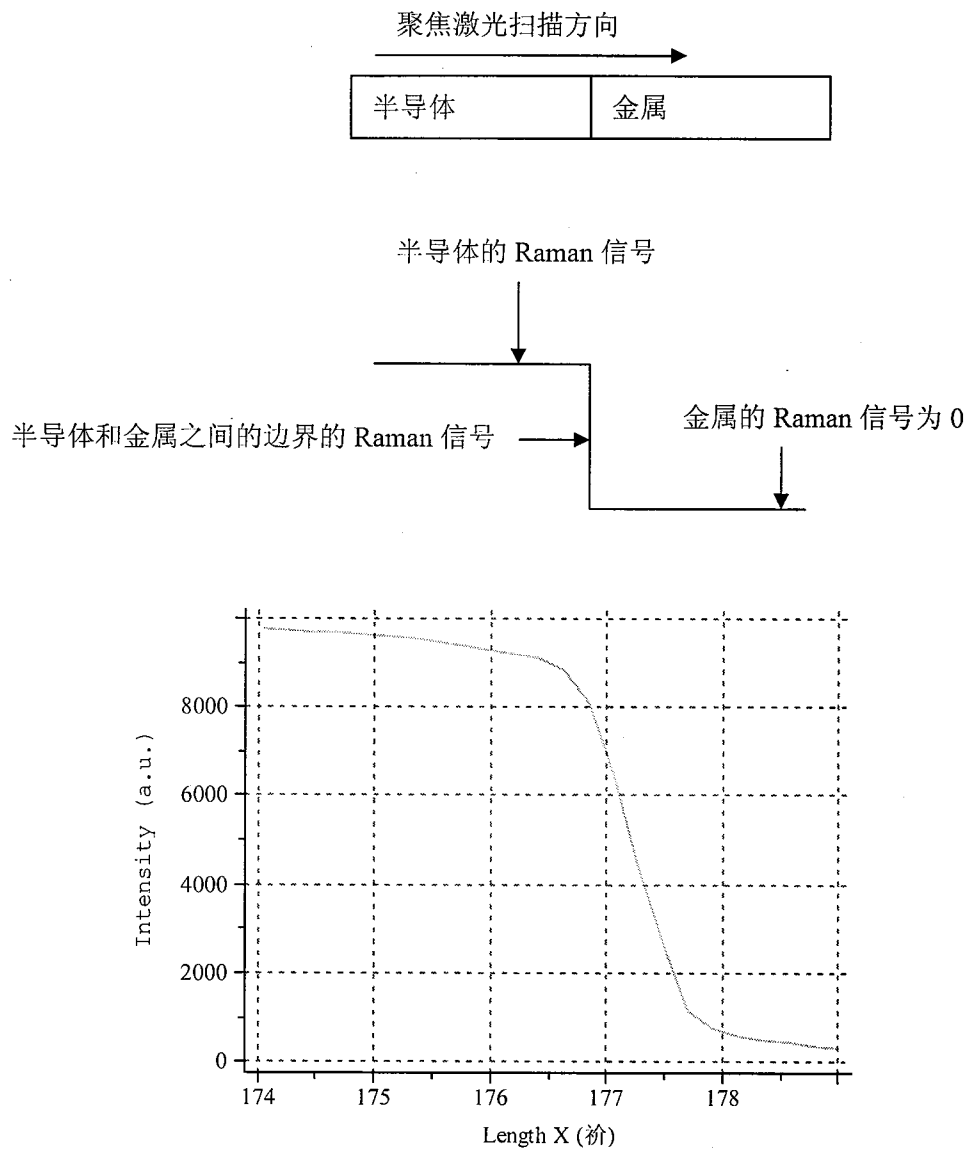


图 4-3 利用 Raman 光谱测量激光光斑大小. 上图为测试所用的样品结构, 中图为激光光斑无限小时的 Raman 信号, 下图为实际测量得到的 Raman 信号

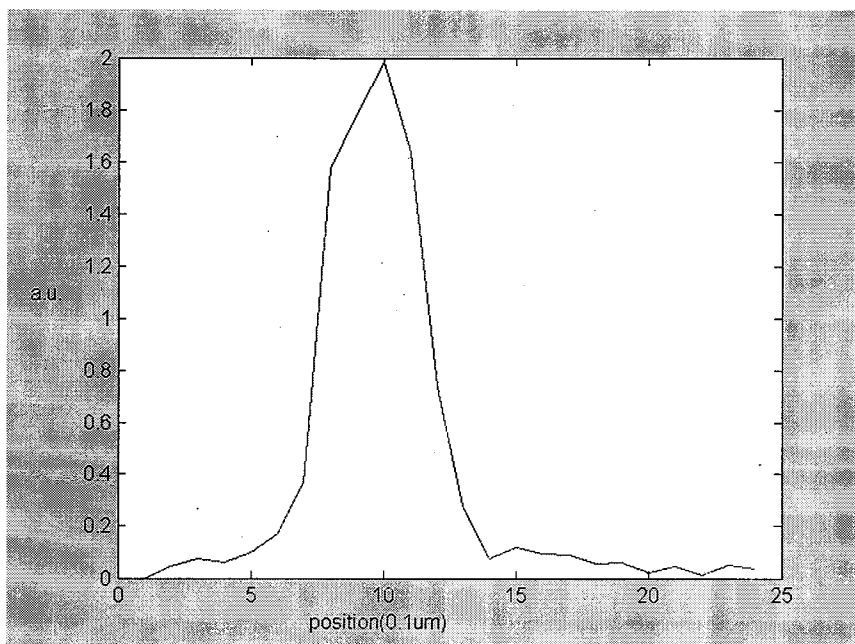


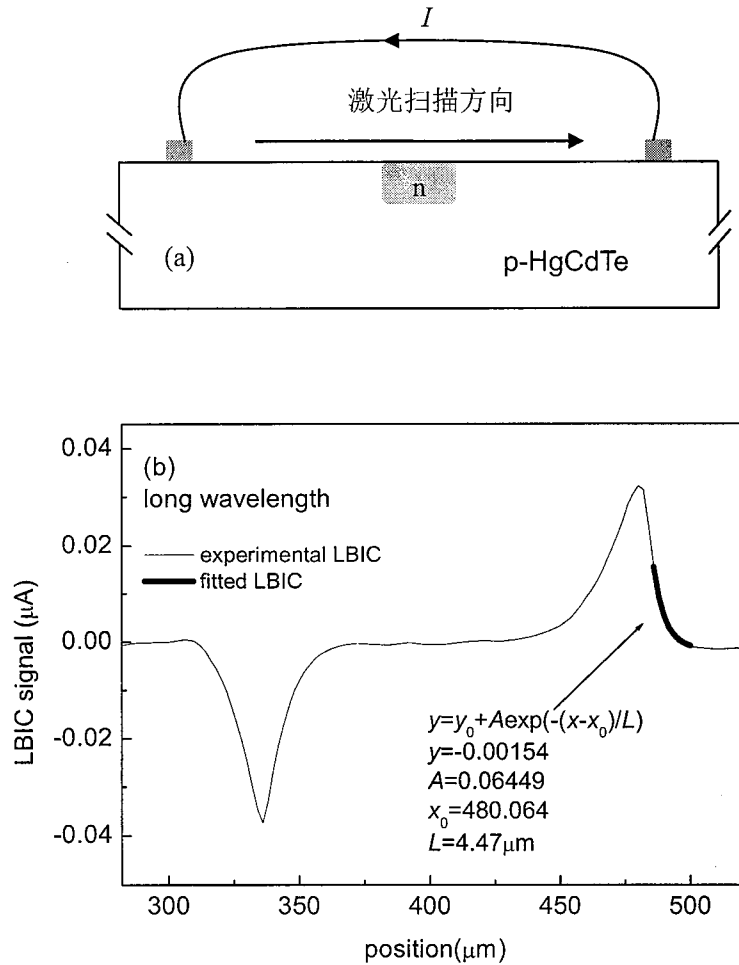
图 4-4 去卷积后得到的激光光斑的能量分布

4.3 HgCdTe n-on-p 结的 LBIC 信号以及 p-HgCdTe 材料的少子扩散长度的提取

图 4-5 (b) 和 (c) 分别为对如图 4-5 (a) 所示的长波和中波 HgCdTe 材料 n-on-p 结的 LBIC 线扫描结果。每个 n-on-p 结的 LBIC 信号均呈现正负双峰结构。图中的峰值对应 n 区与 p 区之间的边界，两个峰值之间的平坦部分为 n 区的 LBIC 信号。正负双峰之间的水平距离约为 $150\ \mu\text{m}$ ，与 n 区的设计尺寸相当。我们对如图 4-5 (a) 所示的长波 HgCdTe n-on-p 结还进行了 LBIC 面扫描，结果如图 4-5 (d) 所示。面扫描过程中，激光光束在器件表面不断移动，得到二维的 LBIC 图像。从面扫描的结果可以清晰地看到呈正方形的 n 区边界。从图 4-5 (d) 还可以看出正方形 n 区的四个边长处的 LBIC 信号是不同的，在两个收集电极连线上的 p 区与 n 区的交界处 LBIC 电流呈现正和负的最大值（分别由箭头所指深色区域所示）。因此可以看出 LBIC 信号与收集电极位置有密切关系。

少子扩散长度是影响器件性能的重要参数，结区外 LBIC 信号的衰减情况体现了光敏元对载流子的侧向收集情况。利用简单的指数衰减模型 $I_{\text{LBIC}} \propto \exp$

$(-x/L)$ 可以从这个衰减曲线中提取 p 型 HgCdTe 材料少子的特征扩散长度 L 。特征扩散长度 L 与 p 型 HgCdTe 材料少子的扩散长度有密切关系但并不等同。这是因为特征扩散长度 L 体现的是多个因素对 LBIC 衰减情况的影响，包括实际的少子扩散长度、表面复合情况、结深等^[4]。在表面复合情况、结深等条件不变的情况下，利用指数模型提取出来的扩散长度与实际的少子扩散长度有对应关系。图 4-5 (b) 和 (c) 分别给出了室温时长波和中波 n-on-p 结的 LBIC 测量结果和扩散长度的提取方法。指数模型的拟合结果显示长波和中波 p 型 HgCdTe 材料少子的特征扩散长度分别约为 $4.5 \mu\text{m}$ 和 $3.8 \mu\text{m}$ 。因为室温时 p 型长波 HgCdTe 材料由于本征激发往往为弱 n 型，因此其少子可能为空穴，因此我们得到的特征扩散长度可能低于低温时器件工作时实际的扩散长度。



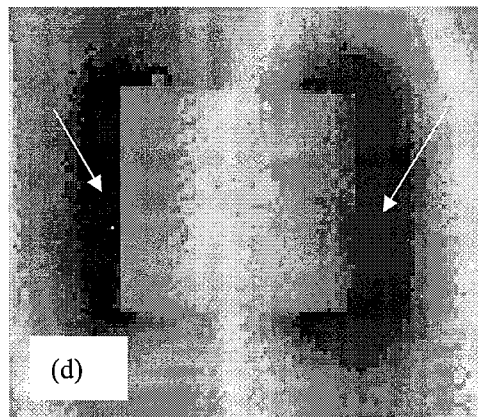
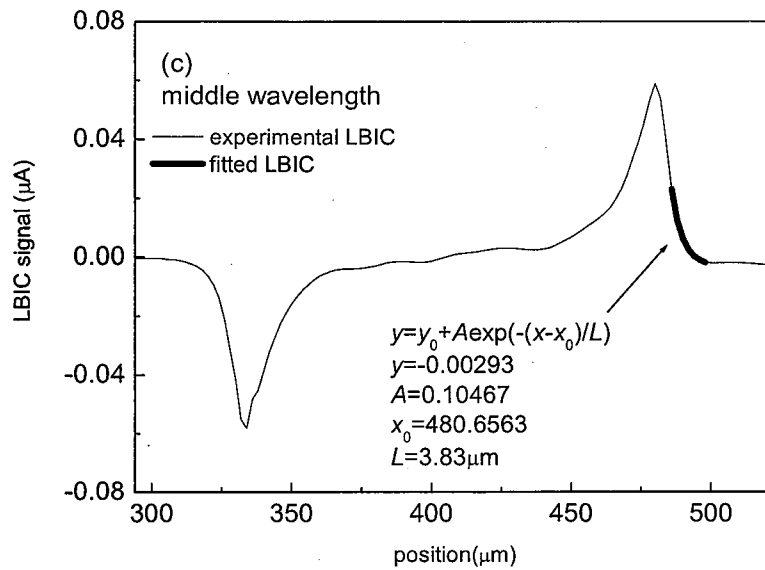


图4-5 长波和中波HgCdTe pn 结的室温 LBIC 信号及其对结区外部分的指数衰减拟合。(a) 器件结构, (b) 长波器件LBIC线扫描结果, (c) 中波器件LBIC线扫描结果, (d) 长波器件LBIC面扫描的结果

4.4 刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构的 LBIC 测量

刻蚀对 HgCdTe 性质的影响是半导体器件工艺中的一个重要课题, 本测试对 ICP (Inductively Coupled Plasma) 方法刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构进行了 300 K 和 83 K 温度下的 LBIC 测量。刻蚀结构的边长 $50 \mu\text{m}$, 间距 $100 \mu\text{m}$ 。对于刻蚀形成的台面结构, 其 LBIC 信号的峰值一方面来源于刻蚀对材料损伤所形成的 pn 结等局域电场, 另一方面来源于刻蚀所引起的台面的物理边界, 因此

一般呈多峰；并且,这种结构的 LBIC 信号没有明显的平坦区域,这可能是因为样品中没有大的内建电场对载流子进行阻挡。图 4-6 (b) 是刻蚀的 HgCdTe 台面结构在 83 K 时的 LBIC 信号。在室温测量中,没有得到 LBIC 信号。83 K 测量时,可以得到周期性的微弱的 LBIC 信号(峰值电流仅有 3 nA),且峰值处呈锯齿状。峰值处对应刻蚀边界。因为没有其他类型的峰,可以认为刻蚀没有使 HgCdTe 材料反型。

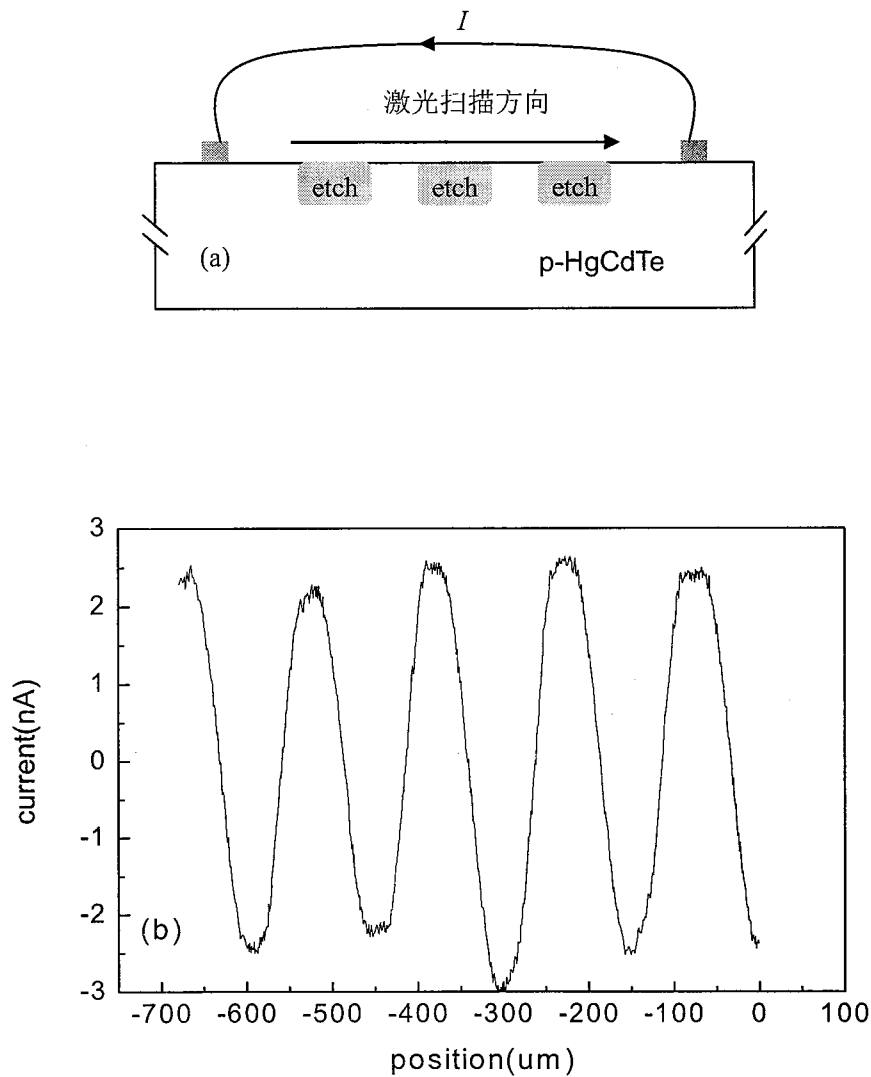


图4-6 ICP方法刻蚀的HgCdTe台面结构及其在83 K时的LBIC信号.

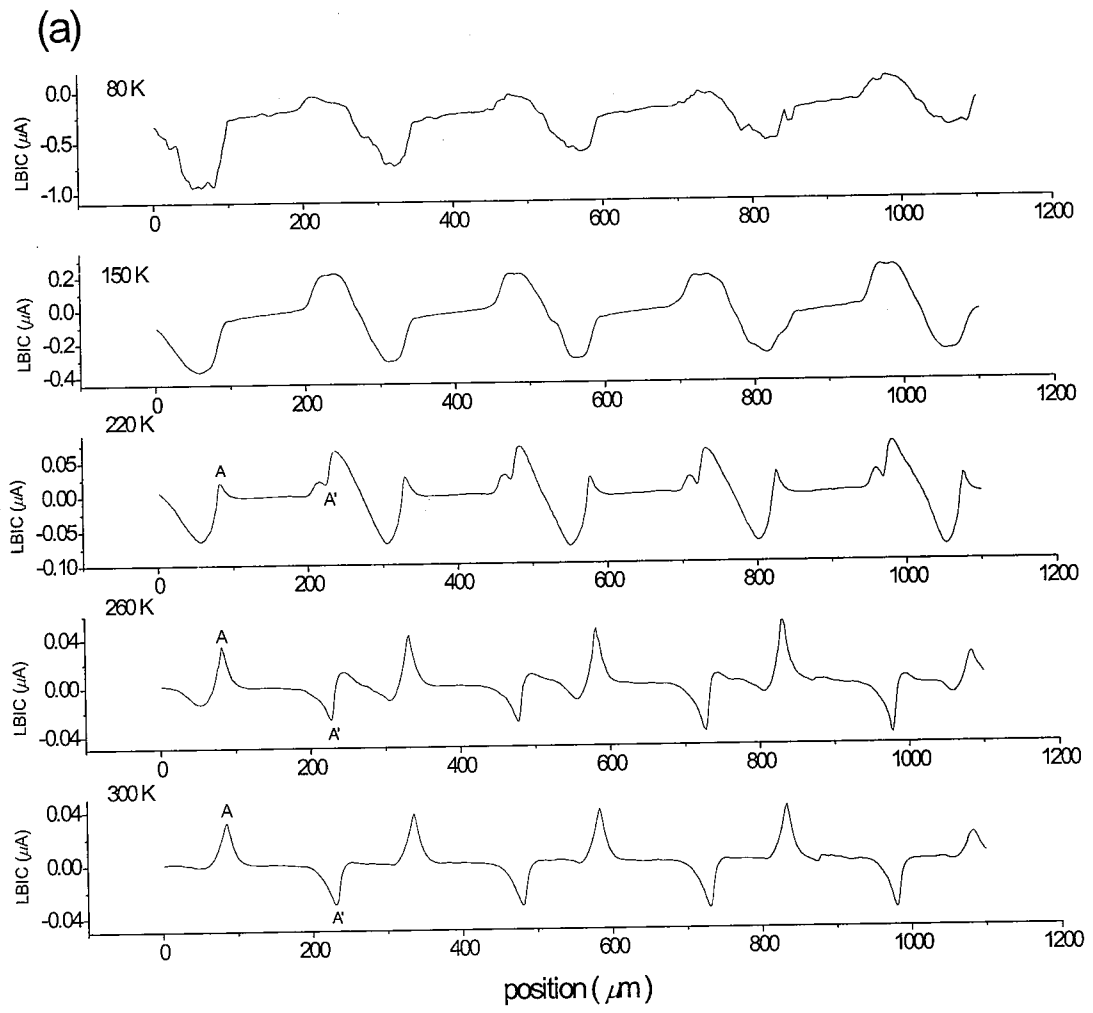
(a) 器件结构示意图; (b) LBIC信号

4.5 HgCdTe 光伏器件的变温 LBIC 的初步探索

4.5.1 LBIC 随温度发生的峰形变化

分别对如图4-5 (a) 所示的长波和中波HgCdTe材料 n-on-p 结线列进行了从液氮温度到室温的 LBIC 线扫描测量。激光功率约为 2 mW。n 区边长为150 μm , 相邻n区间隔为100 μm 。LBIC信号随温度变化而不断演化, 图4-7 给出了长波 HgCdTe 材料 pn 结线列的 LBIC 实验结果。

从图4-7 可以看出, 在室温 (300 K) 时, LBIC信号呈现周期性的正负双峰 (峰 A 和峰 A' 之间距离略小于 n 区设计边长) 结构, 峰值之间是 LBIC 信号近乎为 0 的平坦区域。随着温度降到260 K, 峰 A 和峰 A' 没有发生太大变化, 但峰值周围的平坦区域开始出现 LBIC 信号, 在光敏元之间的区域出现了新的正峰和负峰。在220 K时, 新出现的正负双峰不断增大, 峰 A 和峰 A' 相对变小。到150 K 时, 新出现的正负双峰占据绝对优势, 而峰 A 和峰 A' 已经被淹没在其中。为了更好的观察 LBIC 随温度的变化, 将150 K、220 K、260 K和 300 K时的 LBIC 信号放在同一个坐标系中, 见图4-7 (b)。在测量过程中, 尽量保证扫描是沿完全相同的路线进行的, 这样便于观察同一扫描点在不同温度下的 LBIC 信号的变化。从图4-7 (b) 中可以清晰看到 LBIC 峰值随温度降低发生变化的过程。图4-8 给出了中波 HgCdTe 材料 pn 结线列的变温 LBIC 实验结果。



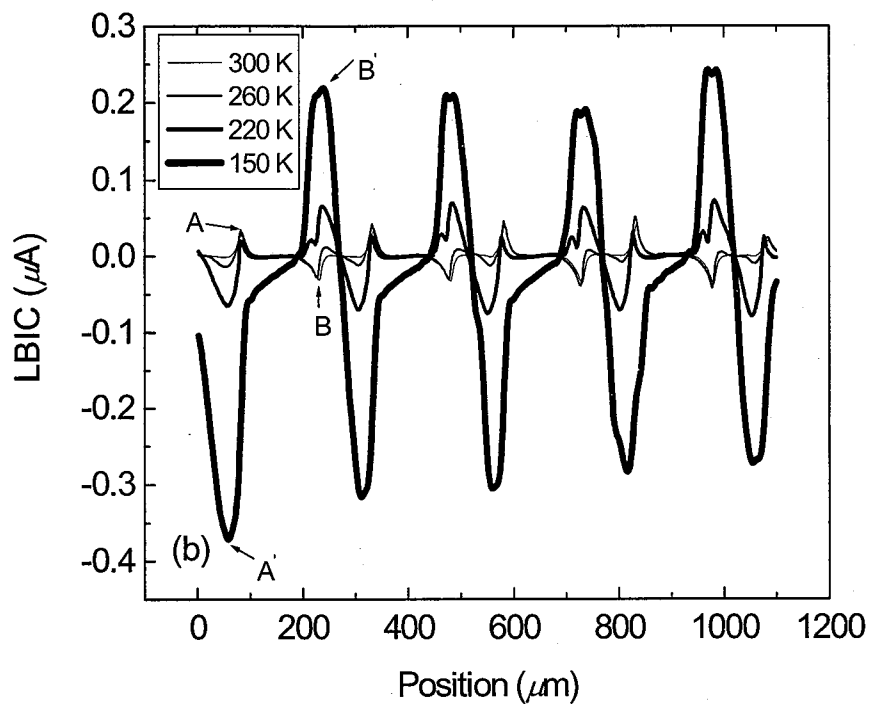


图4-7 长波 HgCdTe pn 结线列的变温LBIC信号. 图 (b) 是将图 (a) 中的结果绘制在一个坐标系内得到的

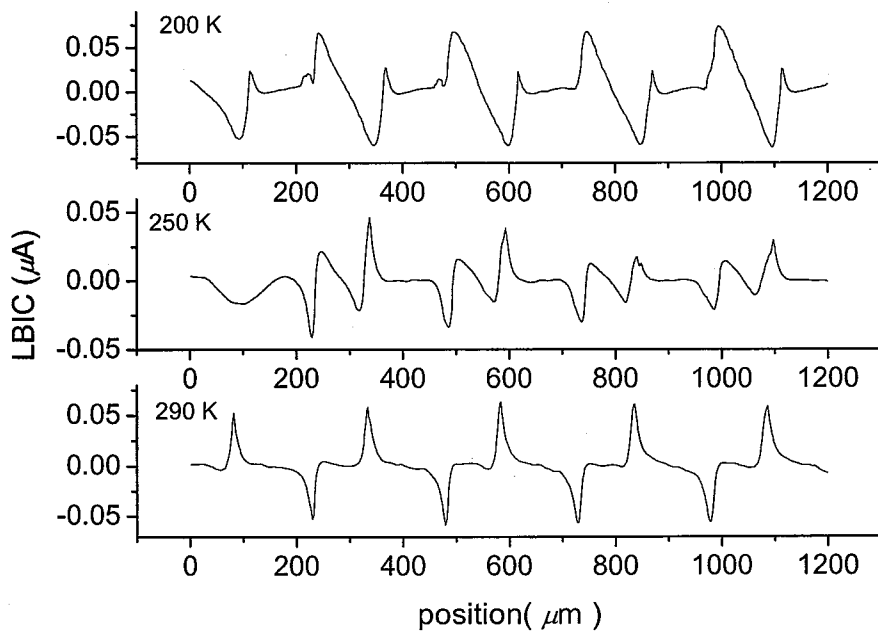


图4-8 中波 HgCdTe pn 结线列的变温 LBIC 信号

以上测试结果笔者还不能做出很好的解释,下面只是给出一些分析和推测,进一步的工作需要重复性的实验和严格的理论建模。

1. 由于在文献中没有看到相关文献,所以曾经考虑是测量接线时引入了附加的电场造成 LBIC 随温度的显著变化。如果是在 LBIC 信号上附加了一个直流电源,则 LBIC 的对称性应该显著下降,但从结果来看,到150 K 时 LBIC 还有较好的对称性。另外,在测量过程中,除温度外的其他测量条件保持不变。

2. 这种现象可能是 HgCdTe 材料的物理性质随温度发生显著变化造成的。由于在测量过程中除温度外的其他测量条件保持不变,因此考虑是 HgCdTe 材料特性随温度发生变化造成的。HgCdTe 材料属于窄禁带半导体,热激发对它的物理性质的影响很大。比如,p 型 HgCdTe 材料在液氮温度下为 p 型,室温下可能为弱 n 型。由此就可以看出,随着温度变化 HgCdTe 材料中的载流子水平等特性发生显著变化。这样,当同样功率的激光束激发样品时,很可能导致LBIC 信号发生显著变化。

为了能更好的对实验数据进行分析,编写了模拟 LBIC 的程序。编写的程序基于半导体器件模拟的漂移-扩散模型。主要的数值方法是:首先将非线性微分方程线性化,离散方法为差分方法,然后通过迭代达到收敛。半导体器件模拟中采用的漂移-扩散模型的基本方程包括如下方程:泊松方程

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla u) = q(n - p - N) \quad (4-1)$$

和电流连续性方程

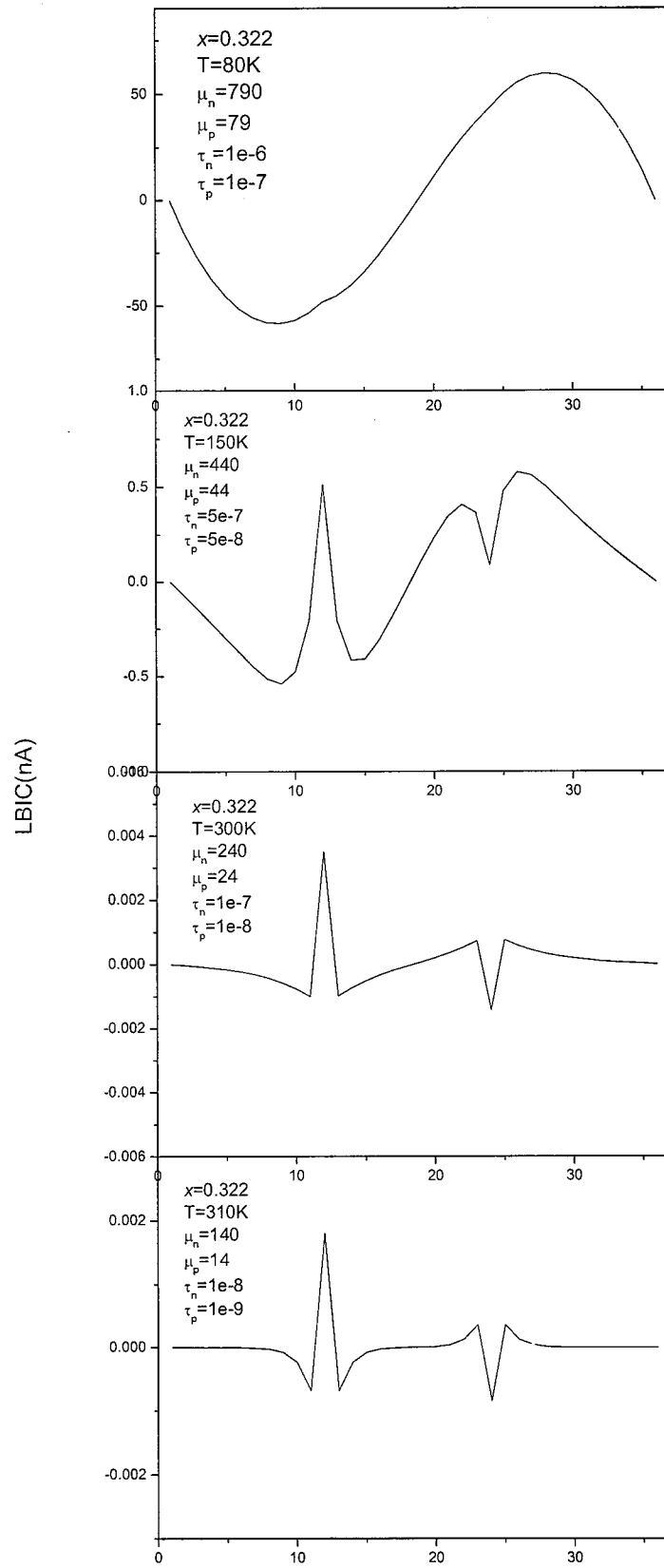
$$\begin{aligned} q \frac{\partial n}{\partial t} &= q(G - R) + \text{div} \vec{J}_n, \vec{J}_n = q(D_n \nabla n - \mu_n n \nabla u), \\ q \frac{\partial p}{\partial t} &= q(G - R) - \text{div} \vec{J}_p, \vec{J}_p = q(-D_p \nabla p - \mu_p p \nabla u) \end{aligned} \quad (4-2)$$

再根据 LBIC 信号的定义

$$I_{LBIC} = \int_{\text{contact}} (\vec{J}_n + \vec{J}_p) \cdot \vec{v} ds \quad (4-3)$$

就可以计算得到理论的 LBIC 信号。严格求解以上方程需要很大的工作量, 因此在本文中采用如下假设: 1, 因为数据采集的时间远大于光电子的寿命, 故采用的是稳态下的漂移-扩散模型。2, 实验中所用的是低能激光, 因此假设光生载流子的产生不影响器件的原有电势分布, 即泊松方程和电流连续性方程间没有耦合, 这样可以简化程序, 减少程序运行时间。3, 因为目前只关心纵向 pn 结的性质, 因此只分析一维情形。4, 载流子复合选择的为 SRH 复合。具体的计算方法请参阅参考文献[7]。

通过改变本征载流子浓度、电子和空穴的迁移率和寿命等随温度变化的参数可以模拟出来的不同温度下的 LBIC 信号, 如图 4-9 所示。拟合结果显示随着温度的降低, 峰值电流显著增大, 这与实验结果相一致。从图中体现出了实验结果中 LBIC 峰的方向随温度发生变化的现象。但是由于程序是基于一系列近似的, 并且计算时所采用的有些材料参数并不一定是实际器件的参数, 因此得到的 LBIC 线型与实际测量结果还有差异。虽然模拟结果和实验结果有些类似, 但还没有从中找到 LBIC 信号随温度变化的主要原因。

图4-9 计算得到的中波 HgCdTe pn结的变温LBIC信号

4.5.2 相邻 n 区间隔很小时的长波 HgCdTe n-on-p 结线列的变温 LBIC 测试

n-on-p 结线列制备所使用的 p-HgCdTe 薄膜材料为分子束外延系统中生长而成, 用 (211)B GaAs 材料作为衬底, Cd 的组分为 0.23。空穴浓度为 $4.96 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (77 K), 迁移率为 $776 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ (77 K)。n 区的形成采用 B 离子注入的方法。B 离子注入条件为: 注入能量 150 KeV, 注入剂量 $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。器件表面的钝化膜为 ZnS 薄膜。在线列的两个远端为两个长条形的欧姆电极, 用以收集 LBIC 信号。图 4-10 给出了线列设计的结构示意图和测量的构形。离子注入的 n 区设计为边长为 $100 \mu\text{m}$ 的正方形, 两个 n 区之间的间隔为 $10 \mu\text{m}$ 。对制备好的器件进行了 300 K 和 85 K 温度下的 LBIC 测量。

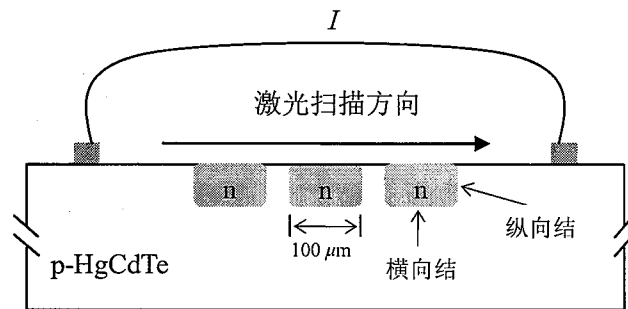


图 4-10 长波 HgCdTe n-on-p 结线列侧视图

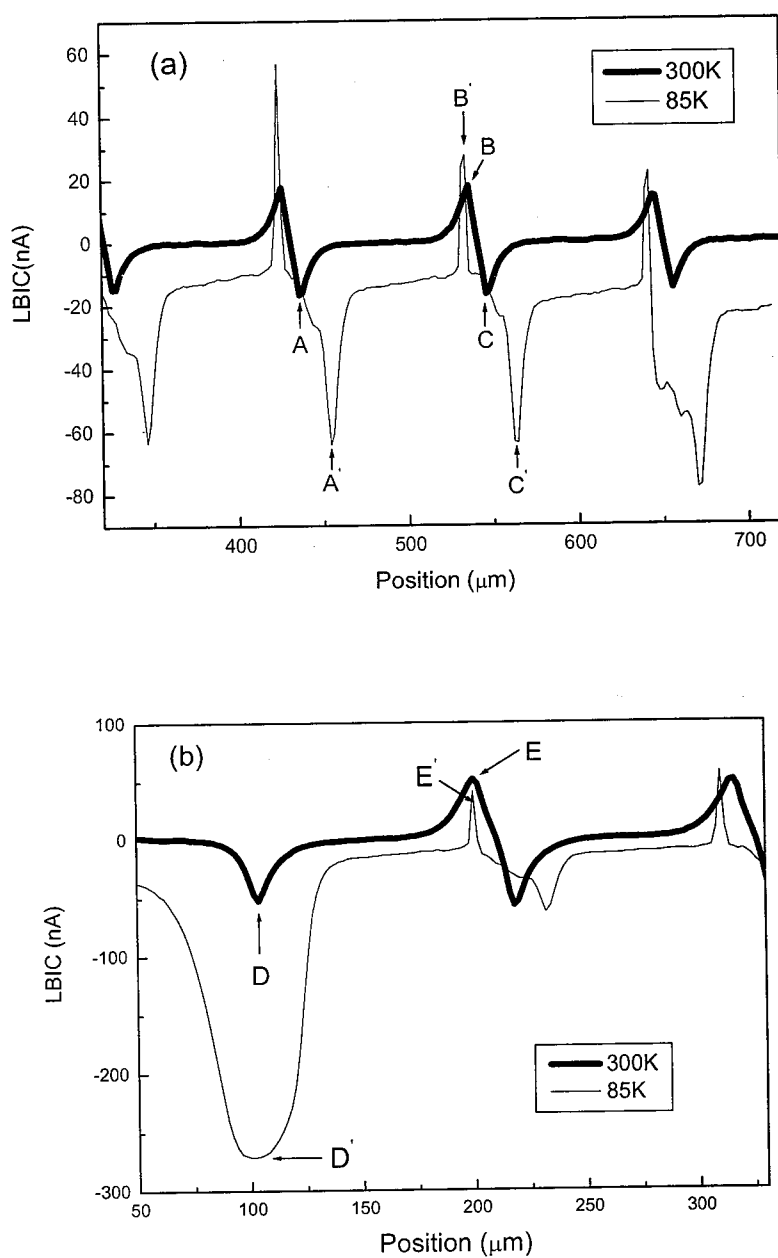


图4-11 (a) 300 K和85 K时长波 HgCdTe 材料 n-on-p 结线列中间部分的 LBIC 信号; (b) 300 K和85 K时长波 HgCdTe 材料 n-on-p 结线列端点处 n 区的 LBIC 信号, 其中300 K时的 LBIC 信号被扩大为原来的3倍

图4-11 (a) 给出了 300 K 和 85 K 时长波 HgCdTe 材料 n-on-p 结线列中间部分 n 区的 LBIC 测量结果。从图4-11 (a) 中可知, 300 K 时线列中间部分

的每个 n 区在激光扫描方向上的两个边界处的 LBIC 峰值 A 和 B 之间的水平距离约为 $100\ \mu\text{m}$ ，相邻两个 n 区的最近边界处的 LBIC 峰值 B 和 C 之间的水平距离约为 $10\ \mu\text{m}$ ，这与器件的设计是基本一致的。但在 85 K 时，线列中间部分的每个 n 区两个边界处的 LBIC 峰值 A' 和 B' 之间的水平距离发生了明显的减小，由原来的约 $100\ \mu\text{m}$ 减少到约 $79\ \mu\text{m}$ ；相邻两个 n 区的最近边界处的 LBIC 峰值 B' 和 C' 之间的距离则明显增加，但 LBIC 信号的周期随温度没有发生明显变化，基本上为 $110\ \mu\text{m}$ 。线列边缘的 n 区的情况与线列中间的 n 区情况不同，在 300 K 时其在激光扫描方向上的两个边界处的 LBIC 信号峰值 DE 之间的距离与 85 K 时的峰值 D'E' 之间的距离没有明显差别，如图 4-11 (b) 所示。并且 D' 的 LBIC 峰值强度远大于 E' 的强度。

出现上述实验现象的原因目前还没有找到。如果仅从 LBIC 的原理出发，可以认为 LBIC 的峰值对应内建电场的峰值处。为了分析图 4-11 (a) 所示的峰值移动的成因，对一个 pnp 结的内建电场分布情况进行求解。采用牛顿迭代法^[8]，求解了一个 pnp 结的一维泊松方程

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\varepsilon} [N_d - N_a + n_i e^{-q\phi/KT} - n_i e^{q\phi/KT}] \quad (4-4)$$

其中， ϕ 为静电势； N_a 、 N_d 分别为 p 区和 n 区的电离杂质的浓度； n_i 为本征载流子浓度； ε 为介电函数； k 为玻耳兹曼常数。在 pn 结处 N_a 和 N_d 之间可以是突变的，也可以是缓变的。本文计算中的缓变结均采用线性缓变结。通过对解得的电势 ϕ 求导可以得到电场强度的空间分布情况。在求解过程中，认为 n_i 、 N_a 、 N_d 为随温度变化的参数，并分别讨论了这些参数变化时内建电场峰值位置的移动情况。计算结果显示，如果 pn 结（即图 4-10 中的纵向结）为突变结，则内建电场的峰值的位置不随 n_i 、 N_a 、 N_d 变化而变化；如果为缓变结，则内建电场峰值位置在一定的条件下可以随着这些参数的变化而变化。对于 n_i ，当其小于 N_a 和 N_d 的取值时，内建电场的峰值的位置不随 n_i 的变化而变化；当 n_i 大于 N_a 和 N_d 的取值时， n_i 的继续增大将促使内建电场峰值位置向电离杂质浓度较高的区域移动，最终导致内建电场强度在 pn 结的缓变区均匀分布。对于 N_a 和 N_d ，内建电场峰值位置随着它们的比值绝对值 $|N_a/N_d|$ 的变化而变化， $|N_a/N_d|$ 越远离 1，则

内建电场的峰值越深入到电离杂质浓度越小的区域。当 $|N_a/N_d|$ 偏离1到一定程度, 内建电场的峰值将不再随 $|N_a/N_d|$ 的变化而移动。另外, 内建电场峰值位置移动的幅度还随 pn 处缓变结的范围而变化。缓变结空间范围越大, 同样条件下峰值位置移动越大。需要指出的是, 实际器件工艺中的纵向结一般是突变结; 而且, N_a 和 N_d 在高于液氮温度下通常是认为不随温度变化的。因此上述的分析不是严格的, 存在着许多假定因素。

4.6 本章小结

本章首先介绍激光束诱导光电流方法的原理和实验装置。然后给出了对一些 HgCdTe 器件结构的测试结果。利用指数衰减模型从室温测得的 LBIC 信号中提取了结区外少子的扩散长度。对刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构进行了300 K和83 K温度下的 LBIC 测量和分析。对 HgCdTe n-on-p结线列进行了变温LBIC测量和简单分析。LBIC方法对于HgCdTe器件检测具有重要意义。但要做到从 LBIC 信号中得到一些有用的结论, 就需要结合器件工艺、测量条件和理论模型, 从整体上考虑。

本章参考文献

- [1] 褚君浩, 窄禁带半导体物理学, 北京: 科学出版社, (2005): p5.
- [2] J.Bajaj, W.E.Tennant, R.zucca, and S.J.C Irvine, Spatially resolved characterization of HgCdTe materials and devices by scanning laser microscopy, Semiconductor Science & Technology 8 (1993) 887.
- [3] C. A. Musca, D.A. Redfern, E.P.G.Smith, J. M. Dell, L. Faraone, and J. Bajaj, Junction depth measurement in HgCdTe using laser beam induced current (LBIC), Journal of Electronic Materials 28 (1999) 603.
- [4] D.A. Redfern, J.A.Thomas, C. A. Musca, J. M. Dell, and L. Faraone, Diffusion length measurements in p-HgCdTe using laser beam induced current, Journal of Electronic Materials 30 (2001) 696.
- [5] J.F. Siliquini, J.M. Dell, C.A. Musca, and L. Faraone, Characterisation of reactive-ion-etching-induced type-conversion in p-HgCdTe using scanning laser microscopy, J. Cryst. Growth 184 (1998) 1219.
- [6] J.T. Wallmark, New semiconductor photocell using lateral photoeffect, Proceedings of the IRE, (1956) 474.
- [7] STAVROS BUSENBERG, WEIFU FANGS, AND KAZUFUMI ITO , MODELING AND ANALYSIS OF LASER-BEAM-INDUCED CURRENT IMAGES IN SEMICONDUCTORS, SIAM J. APPL. MATH. 53 (1956) 187.
- [8] 赵鸿麟, 半导体器件计算机模拟, 天津: 天津大学出版社, (1989): p43.

第五章 基于激光束诱导光电流(LBIC)方法的 HgCdTe 光伏器件串音测量

5.1 前言

近年来, HgCdTe 红外焦平面阵列 (FPAs) 在红外成像应用中发挥着巨大的作用。^[1] 为了进一步提高红外成像的空间分辨率, 红外焦平面阵列中光敏元的尺寸和间距不断减小。这样做的一个负面结果是光敏元之间的串音也随之增大。同时, 器件中少数扩散长度的增加一方面改善了器件的响应性能, 但也会成为光敏元之间串音增大的一个客观原因。红外焦平面阵列中串音大致可以分为两类: 光学串音和电学串音。前者与探测器中红外辐射的光学反射、折射等有关; 后者则来源于光生载流子在器件中的运动。这两方面的串音均影响器件的电学输出。因此, 器件的几何结构、材料参数、器件工艺等都会对器件的串音产生影响。相应地, 对于串音的实验和理论研究将是一个复杂的课题。

在对于 HgCdTe FPAs 串音的实验研究中, 红外小光点是理想的辐射源。但是, 从目前我们所了解的情况来看, 在技术上得到远小于光敏元尺寸和间距的红外小光点是有难度的, 并且测量时需要屏蔽环境中的红外干扰。特别是波长从 $8\ \mu\text{m}$ 到 $14\ \mu\text{m}$ 的红外光点, 其会聚后的直径通常大于 $40\ \mu\text{m}$ ^[2]。因此聚焦的低功率的近红外或可见波段的光常被用来作为 HgCdTe FPAs 串音实验研究的辐射源。^[3, 4] C. A. Musca 等对 HgCdTe 中波红外 (MWIR) 的平面工艺器件和长波红外 (LWIR) mesa 隔离的器件进行了串音测量。^[3] L. Karp 等也曾对 MWIR HgCdTe 器件进行了串音研究。^[4] 在上述两个工作中, HgCdTe 光敏元均采用背入射方式, 辐射源为波长 $1.047\ \mu\text{m}$ 的激光, 测量温度为液氮温度。

对于红外探测器件的串音研究一般采用辐射源背入射方式。在本工作中, 我们尝试采用正入射, 辐射源是一个基于扫描激光显微镜的 $632.8\ \text{nm}$ He-Ne 激光。相对于红外小光点方法, 这种方法的特点是实验设备简单, 不容易受到周

围环境的影响。串音测量的对象为平面工艺制备的不同间距的 HgCdTe LWIR n-on-p 结线列，主要研究相邻光敏元之间的串音特性，测量温度分别为液氮温度和室温。我们首先对实验得到的光电流曲线进行了定性分析，然后计算得到了相邻光敏元之间的串音。串音结果表明，随着光敏元之间的间距增大，相邻光敏元之间的串音呈指数衰减。对影响实验结果的因素进行了讨论。对光敏元以外区域的串音情况也进行了分析。

5.2 用于串音测量的 HgCdTe 光伏器件的制备

HgCdTe LWIR n-on-p 结线列的制备采用平面工艺。Hg 空位掺杂的 p-HgCdTe 薄膜材料通过 5 μm CdTe 缓冲层生长在半绝缘的 GaAs (211) B 衬底上，其结构如图 5-1 所示。材料生长系统为 Riber-32P MBE 系统。p-HgCdTe 薄膜材料的厚度约为 11 μm ，Cd 组分为 23 %。Hall 测量显示，77 K 时空穴迁移率约为 786 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ，空穴浓度约为 $5\times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 。n 区的形成采用硼离子注入方法。光敏元的大小有两种，分别为 $150\times 150 \mu\text{m}^2$ 和 $100\times 100 \mu\text{m}^2$ 。对于尺寸为 $150\times 150 \mu\text{m}^2$ 的光敏元，光敏元之间的设计间距从 35 μm 递增到 65 μm 。在本文中，光敏元之间的间距指的是相邻光敏元之间的最小距离，而不是相邻两个光敏元中心之间的距离，因为我们认为光敏元的尺寸也是影响器件之间串音的因素。

光刻胶
CdTe 覆盖层
p 型 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料
CdTe 缓冲层
GaAs 衬底

图 5-1 p-HgCdTe 薄膜材料结构示意图

HgCdTe LWIR n-on-p 结线列制备的主要工艺流程如下: 清洗, 洗去光刻胶和 cap 层; 生长 ZnS 阻挡层; 光刻对准标记; 刻蚀对准标记; 光刻注入孔; 离子注入形成 n 区; 腐蚀 ZnS 阻挡层; 生长 ZnS 钝化层; 光刻电极孔; 生长金属电极; 划片。图 5-2 为制备好的单个 HgCdTe LWIR n-on-p 结的结构示意图。

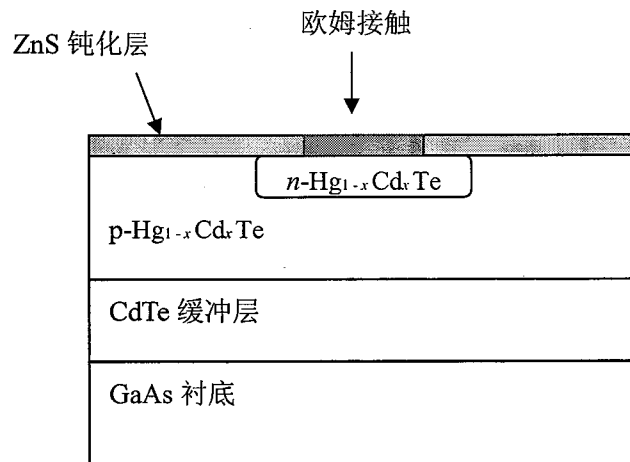


图 5-2 制备的单个 HgCdTe LWIR n-on-p 结的结构示意图

5.3 实验方法

在实验过程中, 我们将光斑直径约为 $1\ \mu\text{m}$ 的 $632.8\ \text{nm}$ He-Ne 激光光束正入射到器件表面。图 5-3 给出了串音测试时 HgCdTe LWIR n-on-p 线列的俯视图和剖面图。其中, 连接光敏元 B 的 n 区和 p 区的电流表记录了激光束在器件表面扫描时的电流响应。光敏元 A 和 C 均为开路。测量系统基于激光束诱导光电流 (LBIC) 测试平台。

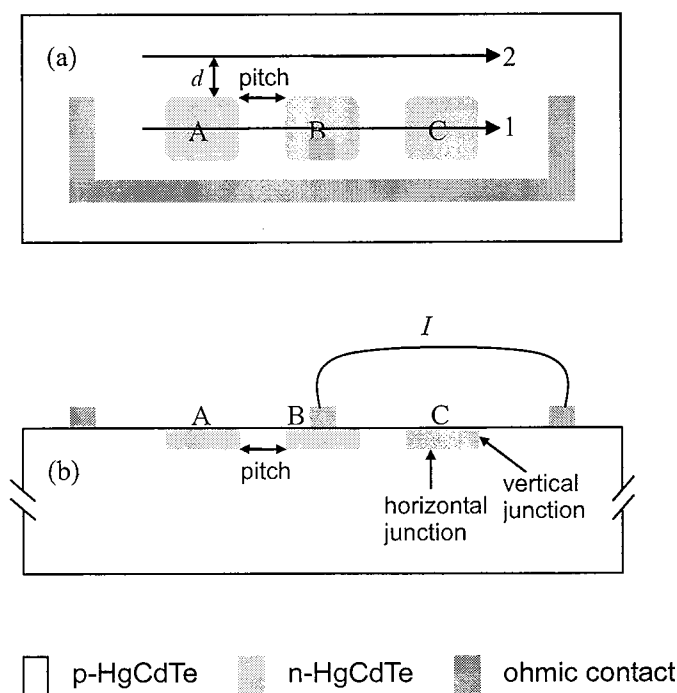


图 5-3 用于串音测量的 HgCdTe LWIR n-on-p 结线列测量配置：(a)俯视图；
(b)剖面图

5.4 结果与讨论

图 5-4 (a) 85 K 时是扫描激光束经过光敏元 A、B 和 C 的线扫描所得到的光电流响应。扫描路线由图 5-3 (a) 中的箭头 1 所指。图 5-4 (b) 给出了对图 5-4 (a) 中较平坦的光电流响应部分 (a、b、c) 的放大图，目的是为了更好的对比这三部分光电流大小的差别。A、B、C 三个光敏元的大小均为 $150 \times 150 \mu\text{m}^2$ ，间距为 $40 \mu\text{m}$ 。当聚焦 He-Ne 激光束在 HgCdTe 光敏元线列上扫描时，光生电子和空穴主要产生在大约 200 nm 深的器件区域内，这个深度小于我们实验中所设计的 n 区的深度约 $1 \mu\text{m}$ 。这些光生载流子中的一部分直接复合，一部分在运动过程中复合，还有一部分将通过扩散和/或漂移运动最终被光敏元 B 收集，从而产生了实验得到的光电流曲线。图 5-4 (a) 显示，光电流响应曲线上有变化剧烈的电流峰和相对较平坦的区域，电流峰存在正负之分，而光电流的平坦区域均为正向电流。下面对这样一种光电流响应的成因做一个定性的分析。

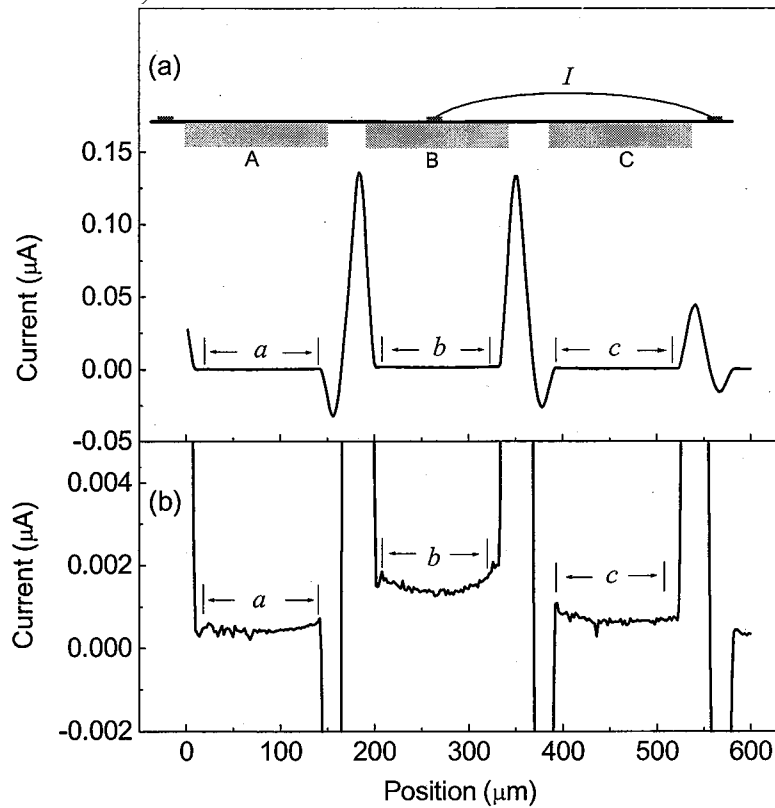


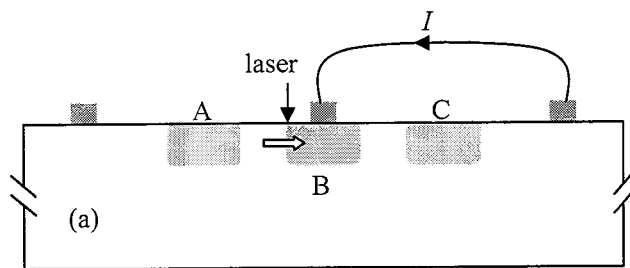
图 5-4 85 K 时通过光敏元 A、B 和 C 中心的线扫描得到的光电流随扫描位置的变化情况. 扫描路线如图 5-3 (a) 中的箭头 1 所示.

图 5-4 (a) 为得到的光电流的总体情况; (b) 为对 (a) 中光电流的三个平坦区域的放大图, 其目的是为了更好的显示这三个平坦区域

(a、b 和 c) 之间光电流的差异

当激光束扫描到光敏元 B 的 n 区边界的纵向 pn 结 (vertical junction) 时, 光生电子和空穴产生在结区或结区附近. 产生在结区以及扩散到结区的电子和空穴将立刻被其所在的结区电场分离, 电子进入 n 区, 空穴进入 p 区. 因为光敏元 B 是短路的, 因此就会产生从其 n 区流向 p 区的电流 (包括下文, 电流方向所指均为器件内部从 n 区到 p 区), 如图 5-5 (a) 所示. 当激光扫描到光敏元 B 表面的其他区域时, 大部分光生电子和空穴并没有产生在结区附近, 只有其中一部分能够通过扩散到达光敏元 B 的横向结 (horizontal junction) 附近, 从而被这里的内建电场分离, 产生从 n 区到 p 区的光电流, 如图 5-5 (b) 所示. 因此, 光敏元 B 的边界处的峰值光电流和其他部分的相对平坦的光电流具有相同的电流方向, 如

图 5-4 (a) 所示。当激光扫描到光敏元 A 的边界时, 光生电子和空穴同样被此处的强大的结区内建电场分离, 电子流向光敏元 A 的 n 区, 而空穴流向 p 区。如果这个流向 p 区的空穴流的方向是向着光敏元 B 的, 可以认为这时光敏元 B 被正向偏置, 因此可以产生从光敏元 B 的 p 区到 n 区的光电流, 如图 5-5 (c) 所示。相反, 如果空穴流的方向是背离光敏元 B 的, 光敏元 B 等效被反向偏置, 从而产生从其 n 区到 p 区的光电流。因此, 在扫描路线上, 光敏元 A 的两个边界处分别存在正和负两种电流峰, 这种正负取决于光敏元 A 的两个边界处纵向结的内建电场方向。当激光束在光敏元 A 的其他表面区域进行扫描时, 光生电子和空穴的一部分同样能够通过扩散到达光敏元 A 的横向结附近, 并且被所在处的内建电场分离。因为光敏元 A 的 n 区和 p 区并没有导线连接, 可以认为是开路。因此, 被内建电场分离的电子和空穴将与其附近的电荷复合, 降低了内建电场以及势垒高度。这样横向 pn 结处载流子的扩散运动将超过漂移运动, 产生了从光敏元 A 的 n 区到 p 区的电子扩散流和方向相反的空穴扩散流。这种扩散流将有可能到达光敏元 B 的结区附近, 从而产生从光敏元 B 的 n 区到 p 区的电流。同时, 由于光敏元 A 的横向结势垒的降低, 一部分产生在光敏元 A 的 n 区中的电子和空穴将直接穿过这个横向结而没有被分离。这部分电子和空穴通过扩散也有可能到达光敏元 B 的结区附近, 被此处的内建电场分离, 产生从光敏元 B 的 n 区到 p 区的光电流, 如图 5-5 (d) 所示。因此, 光敏元 A 和 B 的光电流的平坦区域具有相同的电流方向。



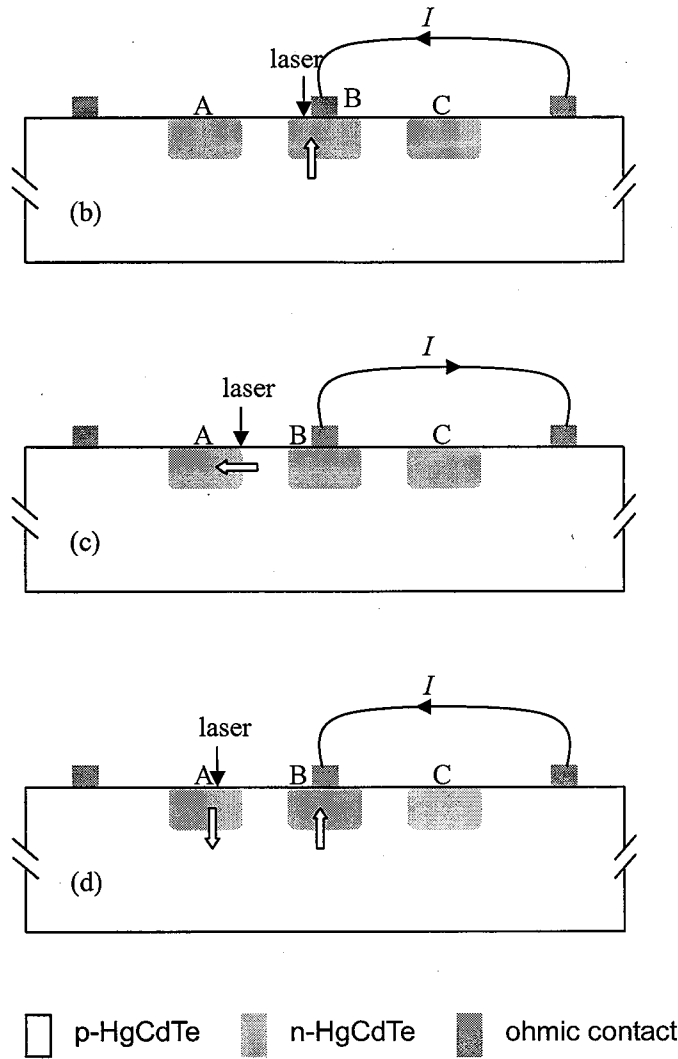


图 5-5 实验得到的光电流曲线的形成原因示意图. 其中的空心箭头为电子定向运动的方向, 实心箭头为电流方向

5.4.1 相邻光敏元之间的串音情况

在背入射情况下, 光敏元 A (或 C) 同 B 之间的串音可以通过 $\text{crosstalk} = I_A/I_B$ (or $\text{crosstalk} = I_C/I_B$) 来计算, 其中 I 是针对一个光敏元的光电流曲线对扫描路线的积分^[3]。但是, 针对背入射时的串音计算方法不适合于正入射方式。从图 5-4 (a) 可以看出, 在每个光敏元的边界附近, 光电流为正或负的峰形, 很难确定光敏元的边界, 因此就不容易准确计算每个光敏元的光响应 I 。另外, 从上文的叙述也可以看出, 纵向结附近的光电流的形成主要取决于纵向结的内建电场, 而横向结对应的光电流不但取决于横向结处的内建电场, 还与光生载流子的扩散特

性有关。因此可以认为,在正入射方式测量 HgCdTe 器件的串音过程中,所得到的光电流曲线中的相对平坦的部分更能代表器件之间的串音特性。于是,本文把图 5-4 中的每个光敏元所对应的相对平坦的光电流响应作为每个光敏元的总体响应 I , 接下来串音的计算仍按照背入射时的计算公式来进行,即光敏元 A (或 C) 同 B 之间的串音为 $\text{crosstalk} = I_A/I_B$ (或 $\text{crosstalk} = I_C/I_B$)。需要注意的是,光敏元 B 的平坦光电流响应区域 b 与光敏元 A 和 C 的平坦光电流响应区域 a 和 c 的形成原因是不相同的。但在一定程度上, a 和 c 的大小情况代表了光敏元 A 和 C 同光敏元 B 之间的串音特性。我们之所以选择正入射方式测量光敏元之间的串音是因为在正入射情况下可以很容易确定光敏元的位置。并且,有些探测器是在正入射方式下工作的。

图 5-6 给出了实验得到的 HgCdTe LWIR n-on-p 线列光敏元之间的串音随光敏元间距的变化情况。图中显示,随着光敏元间距的增大,串音大致呈指数衰减。我们同样发现,对于间距 $35\ \mu\text{m}$ 的两个光敏元,我们所得到的串音为 50%,这个数值远大于文献曾经报道的同样间距的器件的串音 8.2%^[7]。诚然,我们的工作中关于串音的定义,以及实验所使用的材料参数和光敏元的开路 and 短路状态与其他文献不相同^[3, 7]。但这也提醒我们对所得到的串音的大小进行一个评估。文献上曾经报道,采用平面工艺制作的光敏元之间的串音将大于同种材料采用 mesa 结构或其他隔离措施制备的光敏元之间的串音^[3, 8]。因此我们认为本实验中得到的较大的串音可以通过对器件实施台面工艺来减小。图 5-6 还给出了几个不同激光功率下的串音情况,在所选择的几个激发功率下,串音并没有明显的随功率的变化规律。室温时的串音结果也同样列在图 5-6 中。

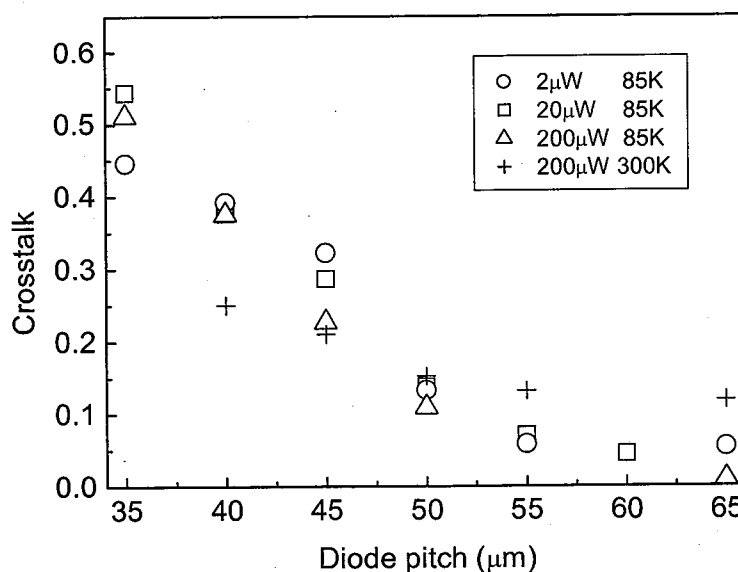


图 5-6 不同光敏元间距、激光功率和温度下 HgCdTe LWIR n-on-p 结线列的串音情况

5.4.2 光敏元以外区域的串音情况

我们还对 HgCdTe LWIR 光敏元以外区域的串音情况进行了测量。实验采用的 HgCdTe LWIR 光伏器件的光敏元大小为 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ ，间距为 $30 \mu\text{m}$ 。图 5-7 给出了一次线扫描所得到的光电流随扫描位置的变化情况。扫描路线为图 5-3 (a) 中箭头 2 所指，测量温度为 85 K。图 5-7 中的曲线 1 是当激光扫描路线与光敏元之间的距离为 $50 \mu\text{m}$ (即图 5-3 中 $d \approx 50 \mu\text{m}$) 时所得到的测量结果。曲线 1 显示，当激光扫描到光敏元 B 所对应的位置时存在一个大的电流峰 (因为只有光敏元 B 是短路的)，当扫描激光远离光敏元 B 时，光电流呈现指数衰减。图 5-7 中的曲线 2 是 $d \approx 20 \mu\text{m}$ 时激光线扫描所得到的光电流情况。在曲线 2，对应光敏元 A 和 C 的位置各有一个较平坦的光电流峰。这两个光电流峰的成因可以从以下两个方面进行推测。其一，在激光扫描位置处所产生的光生载流子通过扩散可以被光敏元 A 或 C 收集，由于两光敏元同光敏元 B 之间存在串扰现象，从而产生光敏元 B 的电流响应。其二，当激光扫描到光敏元 A 或 C 所对应的光敏元以外区域时，由于杜瓦窗口玻璃的散射或样品表面起伏所引起的散射，会造成一部分光进入光敏元内部，因此也可能在光敏元 B 上接收到电

流信号。激光扫描光敏元以外区域时存在的串音现象在 InSb 器件中也曾经有报道^[9]。

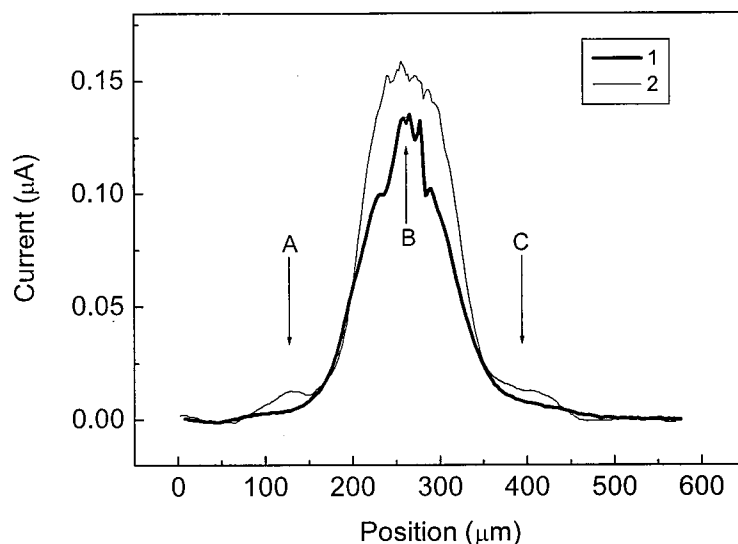


图 5-7 85 K 时通过光敏元 A、B 和 C 以外区域的线扫描得到的光电流随扫描位置的变化情况. 扫描路线如图 5-3 (a) 中的箭头 2 所示. 箭头 A、B 和 C 对应光敏元 A、B 和 C 中心在扫描路线上的投影位置

5.5 本章小结

本章基于激光束诱导光电流 (LBIC) 方法, 对 HgCdTe 长波红外 n-on-p 结线列的串音进行了液氮温度和室温下的测量和分析。实验中, 采用不同功率的激光正入射 HgCdTe 长波红外 n-on-p 结线列表面。测量温度分别为液氮温度和室温。对实验得到的光电流曲线进行了定性分析, 并计算得到了相邻光敏元之间的串音。串音结果表明, 随着光敏元间距增大, 相邻光敏元之间的串音呈指数衰减。对影响实验结果的因素也进行了讨论。另外, 对激光入射到光敏元以外区域时的串音情况进行了分析。

本章参考文献

- [1] J. Rutkowski, P. Madejczyk, A. Piotrowski, et al. Two-colour HgCdTe infrared detectors operating above 200 K, *Opto-Electronics Review*, 16 (2008) 321.
- [2] 应承平, 红外焦平面阵列串音测试技术研究, *计测技术*, 2 (2006) 24.
张志勇, 项道才, 祝金龙, 等. 红外小光点扫描测试系统, *红外技术*, 19 (1997) 21.
- [3] C. A. Musca, J. M. Dell, L. Faraone, et al. Analysis of crosstalk in HgCdTe p-on-n heterojunction photovoltaic infrared sensing arrays, *Journal of Electronic Materials*, 28 (1999) 617.
- [4] L. Karp, Charles A. Musca, John M. Dell, et al. Characterization of crosstalk in HgCdTe n-on-p photovoltaic infrared arrays, *Proceedings of SPIE*, 5274 (2004) 183.
- [5] J. Bajaj, L.O. Bubulac, P.R. Newman, et al. Spatial mapping of electrically active defects in HgCdTe using laser beam induced current, *J. Vac. Sci. Technol A*, 5 (1987) 3186.
- [6] D.A.Redfern, J.A.Thomas, C.A.Musca, et al. Diffusion length measurements in p-HgCdTe using laser beam induced current, *Journal of Electronic Materials*, 30 (2001) 696.
- [7] Akihiro Kawahara, Akira Ajisawa, Keiji Miyamoto, et al. Hybrid 256 x 256 LWIR FPA using MBE-grown HgCdTe on GaAs, *Proceedings of SPIE*, 2552 (1995) 411.
- [8] J. Ziegler, M. Bruder, M. Finck, et al. Advanced sensor technologies for high performance infrared detectors, *Infrared Physics & Technology*, 43 (2002) 239.
- [9] D.S. Smith, J.T. Wimmers, Crosstalk in closely-spaced indium antimonide detectors, *Proceedings of SPIE*, 972 (1988)

第六章 结论和展望

6.1 结论

纵观全文，可以得到以下几点结论：

1. $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 是 PbSe 材料的一种重要三元合金。我们对在 $\text{Zn}_{0.04}\text{Cd}_{0.96}\text{Te}$ 衬底上生长的 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜材料的光学和电学性质进行了研究。其中重点介绍 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料中红外波段的变温透射光谱和变温 Hall 测量。通过对变温透射光谱的拟合，得到了禁带宽度 E_g 、展宽因子 Γ 、振子强度 A 、折射率 n 、吸收系数 α 和 Urbach 带尾参数 E_u 等光学参数随温度的变化规律。从中发现，相比于 III-V 族和 IV 族材料， $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料中存在着较强的电子-声子相互作用。对 $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 进行了 1.25 eV - 4.5 eV 范围内的室温反射测量和 1.5 eV - 4.5 eV 范围内的椭圆偏振光谱测量。与 PbSe 材料相比， $\text{Pb}_{0.96}\text{Mn}_{0.04}\text{Se}$ 材料的高阶临界点没有发生明显的变化。对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 进行了变温 Hall 测量，得到了载流子浓度、迁移率和电阻率随温度的变化情况。通过拟合迁移率谱 (MSA)，发现 p- $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 薄膜中除了空穴外，还存在着少量具有表面或界面的二维电子特性的载流子。

2. IV-VI 族铅盐半导体在中红外半导体激光器方面有着广泛的应用。对 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的增益性质进行了理论计算。得到了 $\text{PbSe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱增益随阱结构参数以及温度等因素的变化情况。其中的阱结构参数包括量子阱的生长方向、阱宽和量子阱势垒材料的组分。

3. 对一些 HgCdTe 器件结构进行了激光束诱导光电流 (LBIC) 测试。利用指数衰减模型从室温测得的 LBIC 信号中提取了结区外少子的扩散长度。对刻蚀形成的 HgCdTe 台面结构进行了 300 K 和 83 K 温度下的 LBIC 测量和分析。对 HgCdTe n-on-p 结线列的变温 LBIC 测量结果进行了简单讨论。

4. 基于激光束诱导光电流 (LBIC) 方法, 对 HgCdTe 长波红外 n-on-p 结线列的串音进行了液氮温度和室温下的测量和分析。在测量过程中, 尝试采用不同功率的 632.8 nm He-Ne 激光正入射器件表面。对实验得到的光电流曲线进行了定性分析, 并计算得到了相邻光敏元之间的串音。串音结果表明, 随着 pn 结之间的间距增大, 相邻 pn 结之间的串音呈指数衰减。对影响实验结果的因素也进行了讨论。另外, 对光敏元以外区域的串音情况进行了分析。

6.2 展望

窄禁带半导体材料在红外器件方面有着重要的应用, 同时在基础物理研究方面也有着鲜明特色。本论文对 IV-VI 族铅盐材料及其器件和碲镉汞 (HgCdTe) 器件检测相关的课题做了一些初步的研究, 进一步的研究工作可以在如下方面开展:

1. 本文对 $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ 材料进行了一系列的表征。在光学方面, 着重分析了透射光谱, 而其他光学表征手段比如荧光、Raman 和椭圆偏振等光谱方法开展的还远远不够。因此可以尝试开展其他光学表征手段。在电学方面, 进一步开展变磁场电学测试, 对 IV-VI 族铅盐及其合金的电学和输运性质做深入研究。

2. 本文对 $\text{PbSe/Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$ 量子阱激光器的增益性质进行了理论计算。但由于这类材料的特殊物理性质, 还需要更精确和全面的理论模型。另外, 在实验方面对这类量子阱激光器的增益研究开展的还很少。因此可以开展这方面的实验工作。

3. 虽然激光束诱导光电流 (LBIC) 方法是一种简便快捷、非常适合 HgCdTe 材料和器件结构的测试方法。但不论在实验方法还是数据分析方面都还需要细致深入的研究。比如对实验条件的精确控制和描述等。

附录

附录 A IV-VI 族材料约化态密度的计算

正文中公式 (3-12) 为 IV-VI 族材料的带边色散关系

$$E_{c,v} = -\frac{1}{2}E_g \pm \sqrt{\frac{1}{4}E_g^2 + \frac{\hbar^2}{m_0^2}(p_t^2 k_t^2 + p_l^2 k_l^2)} \quad (\text{A-1})$$

其中 E_c 和 E_v 分别为导带和价带能级。利用电子和空穴有效质量的定义可以将上式改写成

$$E_{c,v} = -\frac{1}{2}E_g \pm \sqrt{\frac{1}{4}E_g^2 + E_g \left(\frac{\hbar^2}{2m_t^*} k_t^2 + \frac{\hbar^2}{2m_l^*} k_l^2 \right)} \quad (\text{A-2})$$

其中 m_t^* 和 m_l^* 分别为电子和空穴在 L 点的横向和径向有效质量, 在此认为电子和空穴的有效质量的绝对值相等。在直角坐标系下, 有

$$E_{c,v} = -\frac{1}{2}E_g \pm \sqrt{\frac{1}{4}E_g^2 + E_g \left(\frac{\hbar^2}{2m_x^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*} k_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} k_z^2 \right)} \quad (\text{A-3})$$

则带间跃迁能量 ($E = E_c - E_v$) 满足

$$E = \sqrt{E_g^2 + 4E_g \left(\frac{\hbar^2}{2m_x^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*} k_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} k_z^2 \right)} \quad (\text{A-4})$$

对于量子阱体系, z 方向上的波矢 k_z 可以精确求解, 因此令

$$\frac{\hbar^2}{2m_z^*} k_z^2 = \Delta \quad (\text{A-5})$$

这样公式 (A-4) 可以表示为

$$E = \sqrt{E_g^2 + 4E_g \left(\frac{\hbar^2}{2m_x^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*} k_y^2 + \Delta \right)} \quad (\text{A-6})$$

将上式写成椭圆方程形式:

$$1 = \frac{k_x^2}{a^2} + \frac{k_y^2}{b^2} \quad (\text{A-7})$$

其中

$$a^2 = \frac{m_x^*(E^2 - E_g^2 - 4E_g\Delta)}{2E_g\hbar^2}$$

$$b^2 = \frac{m_y^*(E^2 - E_g^2 - 4E_g\Delta)}{2E_g\hbar^2}$$
(A-8)

利用 2 维态密度的公式可以求得量子阱内的约化态密度为

$$\rho_{red}(E) = \frac{\partial N}{S_r \partial E} = \frac{\sqrt{m_x^* m_y^*} E}{2\pi\hbar^2 E_g}$$
(A-9)

其中

$$S_k = \pi ab$$
(A-10)

考虑到量子阱中存在多个量子化能级公式 (A-9) 应该写做

$$\rho_{red}(E) = \frac{\sqrt{m_x^* m_y^*}}{2\pi\hbar^2 E_g} \cdot E \cdot \sum_{n=1}^{\infty} H[E - (e_{n,c} - e_{n,v})]$$
(A-11)

类比约化态密度的求解方法, 求得的导带和价带的态密度为

$$\rho_{c(v)}(E_{c(v)}) = \frac{\sqrt{m_x^* m_y^*}}{\pi\hbar^2 E_g} \cdot (2E_{c(v)} + E_g) \cdot \sum_{n=1}^{\infty} H[E_{c(v)} - (e_{n,c} - e_{n,v})]$$
(A-12)

附录 B 注入的电子浓度 n 和空穴浓度 p 的计算

以电子为例, 量子阱中的电子浓度为

$$n = \frac{g}{w} \int_{\varepsilon_{1,c}}^{\infty} \rho_c(E_c) f_c(E_c) dE_c$$
(B-1)

其中 g 为简并度, w 为阱宽, ρ_c 为导带态密度, 由 (A-12) 所示。 $f_c(E_c)$ 为导带电子的 Fermi-Dirac 分布函数

$$f_c(E_c) = \frac{1}{1 + \exp[(E_c - E_{fc})/k_B T]}$$
(B-2)

其中 E_{fc} 为导带电子的准费米能级。经过计算公式 (B-1) 得到电子浓度

$$n = \frac{g\sqrt{m_x^* m_y^*}}{\pi\hbar^2 w} \left\{ k_B T \left(1 + \frac{2\varepsilon_{1,c}}{E_g} \right) [\ln(1 + e^{-\eta}) + \eta] + \frac{2}{E_g} (k_B T)^2 \xi \right\}$$
(B-3)

其中, $\eta = (E_{fc} - \varepsilon_{1,c})/kT$, $\xi = \int_0^{\infty} \frac{x}{1 + \exp[x - \eta]} dx$, $x = (E_{fc} - \varepsilon_{1,c})/kT$, ξ 可以通过

Fermi - Dirac 积分 $F_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{t^j}{1 + \exp[t - x]} dt$ 求得。

附录 C IV-VI 族材料带边 Bloch 态之间的带间跃迁动量矩阵元的计算

带边 Bloch 态的带间跃迁的动量矩阵元的平方 M^2 可以表示为

$$M^2 = \sum_{i,j=\uparrow\downarrow} \left| \langle C_i | \vec{e} \cdot \vec{p}_{CV}(0) | V_j \rangle \right|^2 \quad (C-1)$$

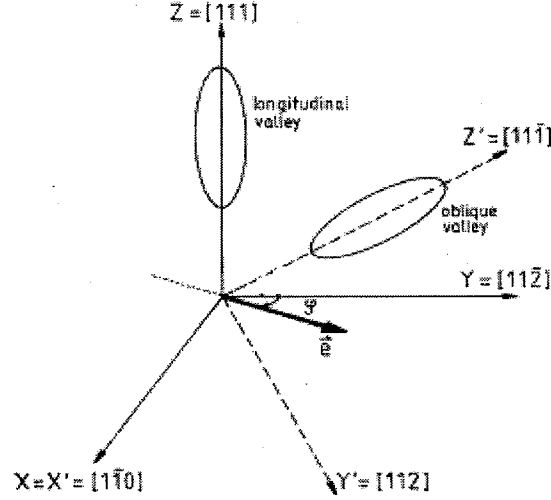


图 C-1 IV-VI 族材料布里渊区 L 点等能面示意图

在沿 $[111]$ 方向生长的量子阱中,对于径向方向为 $[111]$ 方向的能谷,在以 $[111]$ 为 z 方向的能谷坐标系 (x, y, z) 中,若 TE 模电极化矢量 $\mathbf{e}$ 在 xy 平面内,于是 $\mathbf{e}$ 的坐标 (e_x, e_y, e_z) 为 $(\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$, 则公式 (C-1) 可以写做

$$\begin{aligned} \langle C \uparrow | \vec{e} \cdot \vec{p}_{CV}(0) | V \uparrow \rangle &= p_l e_z \\ \langle C \uparrow | \vec{e} \cdot \vec{p}_{CV}(0) | V \downarrow \rangle &= p_t (e_x + i e_y) \\ \langle C \downarrow | \vec{e} \cdot \vec{p}_{CV}(0) | V \uparrow \rangle &= p_t (e_x - i e_y) \\ \langle C \downarrow | \vec{e} \cdot \vec{p}_{CV}(0) | V \downarrow \rangle &= -p_l e_z \end{aligned} \quad (C-2)$$

对于 $\mathbf{e}$ 为非极化光的情况,在求得上面 4 个等式的模方之和后,再对角度部分 φ 在 0 到 2π 内积分并除以 2π 。得到

$$M^2 = 2p_t^2 \quad (C-3)$$

在求解另外 3 个斜谷的带边 Bloch 态带间跃迁动量矩阵元平方 M^2 时,需要先求出 $\mathbf{e}$ 在以各斜谷径向轴为 z 轴的坐标系 (x', y', z') 中的坐标 (e_x', e_y', e_z')

$$\begin{pmatrix} e'_x \\ e'_y \\ e'_z \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} \quad (\text{C-4})$$

其中, T 为从 (e_x, e_y, e_z) 转动到 (e'_x, e'_y, e'_z) 的转动矩阵。对于沿 $[111]$ 方向生长的量子阱的以 $[1\bar{1}\bar{1}]$ 为 z 方向的斜谷, 如图 C-1 所示有

$$(x, y, z) = ([1\bar{1}0], [11\bar{2}], [111]) \quad (\text{C-5})$$

$$(x', y', z') = ([1\bar{1}0], [112], [1\bar{1}\bar{1}]) \quad (\text{C-6})$$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \quad (\text{C-7})$$

其中, $\cos\theta=1/3$ 。将公式 (C-7) 代入 (C-4) 求得

$$(e'_x, e'_y, e'_z) = (\sin\varphi, \frac{1}{3}\cos\varphi, \sqrt{\frac{8}{9}}\cos\varphi) \quad (\text{C-8})$$

再将公式 (C-8) 代入 (C-2) 并对角度 φ 求平均后得带边 Bloch 态带间跃迁动量矩阵元平方 $M^2=3*(8p_t^2+10p_l^2)/9$, 其中 3 为同类能谷简并度。利用同种方法, 对于以 $[001]$ 方向为 z 方向生长的量子阱, 可以求得 e 在以 4 个斜谷的径向轴为 z' 的坐标系中的坐标为

$$(e'_x, e'_y, e'_z) = (\sin\varphi, \sqrt{\frac{1}{3}}\cos\varphi, \sqrt{\frac{2}{3}}\cos\varphi)$$

$M^2=4*2(2p_t^2+p_l^2)/3$, 其中 4 为同类能谷简并度。

以 $[110]$ 方向为 z 方向生长的量子阱, 4 个能谷均为斜谷, 但分为两组, 一组为 $[1\bar{1}1]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}1]$, 这两个能谷的径向轴均垂直于 $[110]$, 为 a 组。另一组为 $[11\bar{1}]$ 、 $[111]$, 这两个能谷的径向轴均不垂直于 $[110]$, 为 b 组。对于 a 组,

$$(e'_x, e'_y, e'_z) = (\cos\varphi, 0, -\sin\varphi)$$

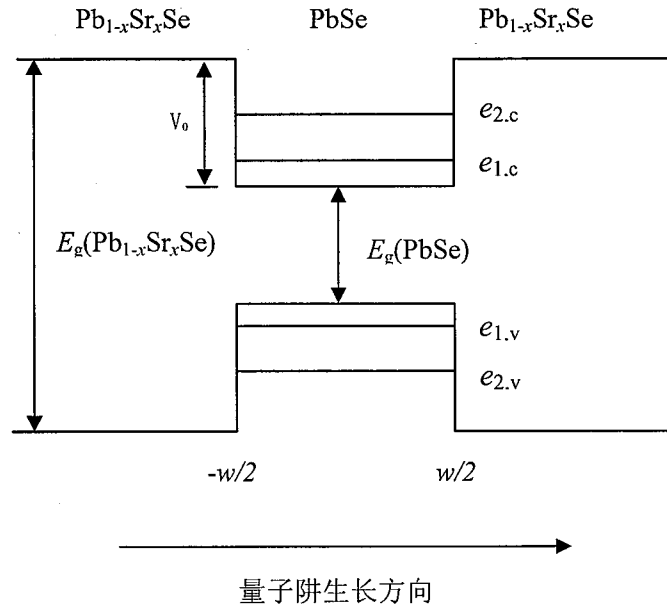
$M^2=2*(p_t^2+p_l^2)$, 其中 2 为同类能谷简并度。对于 b 组,

$$(e'_x, e'_y, e'_z) = (\sqrt{\frac{2}{3}}\sin\varphi, \cos\varphi, -\sqrt{\frac{1}{3}}\sin\varphi)$$

$M^2=2(5p_t^2+p_l^2)/3$, 其中 2 为同类能谷简并度。

附录 D PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 单量子阱的量子化能级和包络函数的计算

如果不考虑远带的影响, IV-VI 族材料的导带和价带可以认为近似对称, 因此在这里只求解电子的情况。在 $k \cdot p$ 微扰模型下, 电子的波函数可以表示为包络波函数和 Bloch 波函数的乘积。相对于材料的晶格常数, 包络函数是缓变的。对于图 D-1 所示的 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱体系, 在其生长方向 (z 方向) 上的包络函数 Ψ 和量子化能级 ($e_{n,c}$ 和 $e_{n,v}$) 可以通过求解如下有限方势阱的定态 Schrödinger 方程得到。

图 D-1 PbSe/Pb_{1-x}Sr_xSe 量子阱体系的能级图

$$\begin{aligned} \psi'' + k^2 \psi &= 0, & |x| \leq w/2 \text{ (阱内)} \\ \psi'' - \beta^2 \psi &= 0, & |x| \geq w/2 \text{ (阱外)} \end{aligned} \quad (\text{D-1})$$

其中 $k = \sqrt{2m_{\text{well}}E}/\hbar$, $\beta = \sqrt{2m_{\text{barrier}}(V_0 - E)}/\hbar$ 。公式 (D-1) 的偶宇称态解为

$$\begin{aligned} \psi &= \cos kz, & |x| \leq w/2 \text{ (阱内)} \\ \psi &= Ce^{-\beta|x|}, & |x| \geq w/2 \text{ (阱外)} \end{aligned} \quad (\text{D-2})$$

其中, C 为待定常数。由波函数及其及其导数在量子阱边界的连续性可以得到如下关系式

$$\tan \frac{k w}{2} = \frac{\beta}{k} \quad (\text{D-3})$$

利用图解法求得公式 (D-3) 的数值解, 从中可以得到各个量子化能级。再将得到的量子化能级以及波矢 k 和 β 代入公式 (D-2) 就可以得到电子在阱内和阱外的包络函数。然后将电子和空穴的包络函数的重叠部分在量子阱内积分即得重叠积分 I 。