

чение ее производной (одномерный конечный симплекс-элемент включает в себя два узла и, следовательно, описывается четырьмя параметрами, т. е. функции формы кубичны). Это обеспечивало отсутствие скачков любой из вычисляемых функций на стыке элементов. Варизонный слой разбивался на 10—20 равных элементов, интегрирование велось с помощью 5-точечной квадратурной формулы Гаусса—Лежандра. Программа запускалась со значениями рекомбинационных параметров, взятыми из [1, 2], и произвольной их зависимостью от координаты [экспериментальной зависимости $\tau(x)$ обнаружить в литературе не удалось] и давала качественно приемлемые результаты. При разности значений ширины запрещенной зоны, многократно превышающей kT , порядок функции y_1 на протяжении варизонного слоя претерпевает резкий спад, что обязывает, во-первых, вести расчет с двойной точностью, во-вторых, увеличивать число конечных элементов, снижая перепад на каждом из них. Нежелательны большие различия в порядках между значениями функции y_1 и ее производной, так как они вычисляются из единой системы линейных алгебраических уравнений; для выравнивания порядков можно рекомендовать масштабирование. В некоторых случаях расчеты показывают, что длина варизонного слоя выбрана неудачно и ее следует уменьшить или увеличить. Иногда расчетный градиент ширины запрещенной зоны не может быть реализован технически, учет ограничений на него требует переработки алгоритма.

Программа может быть предоставлена заинтересованным лицам.

Список литературы

- [1] Коваленко В. Ф., Пека Г. П., Шепель Л. Г. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 11. С. 2084—2088.
- [2] Коваленко В. Ф., Пека Г. П., Шепель Л. Г. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 7. С. 1350—1354.
- [3] Пека Г. П., Токалин О. А., Дряпико Н. К. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 6. С. 1087—1092.
- [4] Дряпико Н. К., Пека Г. П., Чумак С. М. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 11. С. 2013—2017.
- [5] Гапоненко В. Н., Лунин Л. С., Лунина О. Д. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1987. Т. 23. В. 8. С. 1247—1250.
- [6] Понтрягин Л. С., Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Мищенко В. Ф. Математическая теория оптимальных процессов. М., 1976. 392 с.
- [7] Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач. М., 1988. 552 с.
- [8] Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М., 1976. 542 с.
- [9] Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М., 1979. 392 с.

Саратовский государственный
университет им. Н. Г. Чернышевского

Получено 8.10.1990
Принято к печати 28.02.1991

ФТП, том 25, вып. 6, 1991

КВАНТОВЫЙ ВЫХОД ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ [В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($0.4 < x < 0.74$)

Баженов Н. Л., Иванов-Омский В. И., Ижнин А. И.,
Смирнов В. А.

Известно, что твердые растворы $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) применяются в качестве детекторов ИК излучения в широком спектральном диапазоне, так как при изменении содержания $CdTe$ и $HgTe$ ширина запрещенной зоны изменяется от 0 до 1.6 эВ. Представляет интерес оценка предельных возможностей этих материалов в качестве источников ИК излучения для перспективных систем связи на основе оптических волокон с низким уровнем потерь, работающих в длинноволновой области спектра.

Ранее в работе [1] была измерена абсолютная интенсивность фотолюминесценции (ФЛ) в КРТ состава $x \sim 0.4$ (с шириной запрещенной зоны $E_g \sim 0.52$ эВ) при $T=300$ К и было показано, что основным механизмом безызлучательной рекомбинации является оже-рекомбинация, в которую наибольший вклад вно-

сят процесс с участием двух электронов и тяжелой дырки (ССНС) и процесс с участием двух тяжелых дырок и электрона с переходом тяжелой дырки в зону легких дырок (СННЛ). В настоящей работе расширена область исследованных составов, а в расчетах дополнительно учтен оже-процесс с участием электрона и двух тяжелых дырок с возбуждением дырки в спин-орбитально отщепленную зону (СННС). Этот процесс идет наиболее интенсивно, когда значение E_g близко к величине спин-орбитального расщепления Δ , которое в КРТ составляет ~ 1 эВ [2]. Эффективность этого механизма в КРТ составов $0.6 < x < 0.7$ была оценена в работе [3], посвященной анализу процессов ударной ионизации и оже-рекомбинации в лавинных фотодиодах.

Для оценки внутреннего квантового выхода ФЛ воспользуемся процедурой, описанной в работе [1]. Предполагая, что уровень возбуждения высокий, т. е. $\Delta n = \Delta p \gg n_0, p_0$, где n_0, p_0 и $\Delta n, \Delta p$ — концентрации равновесных и неравновесных электронов и дырок, соответственно получаем, что квазиуровни Ферми электронов ζ_e и дырок ζ_h связаны уравнением нейтральности

$$N_c F_{1/2} \left(\frac{\zeta_e}{kT} \right) = N_v F_{1/2} \left(\frac{\zeta_h}{kT} \right),$$

где N_c и N_v — эффективные плотности состояний электронов и дырок в соответствующих зонах, F_j — интеграл Ферми индекса j .

Уравнение баланса записывается в виде

$$G = n^2 \left[\gamma_{ph} + \frac{N_c R_{A7}}{1 + \exp \left(- \frac{\zeta_e}{kT} \right)} + R_{A1} N_c F_{3/2} \left(\frac{\zeta_e}{kT} \right) \right] + G_{s_0}(\zeta_e), \quad (1)$$

где G — скорость генерации носителей заряда, R_{A1} и R_{A7} — коэффициенты оже-процессов ССНС и СННЛ соответственно, γ_{ph} — коэффициент излучательной рекомбинации, G_{s_0} — скорость оже-рекомбинации процесса СННС, $n = n_0 + \Delta n$.

Выражения для γ_{ph} , R_{A1} и R_{A7} при произвольной степени вырождения электронного газа приведены в работе [1]. Скорость процесса СННС при произвольной степени вырождения электронного газа, согласно работе [4], можно записать

$$G_{s_0} = C_2 \int_0^\infty z^6 dz \int_0^\infty \frac{y^6 dy}{(y^2 + a_0^2)^2} \int_{-1}^{+1} \frac{d\mu_1 (1 - \mu_1^2)^2}{y^2 + z^2 + 2yz\mu_1} \int_{-1}^{+1} d\mu [g(q_-) + g(q_+)], \quad (2)$$

$$C_2 = \frac{36 \sqrt{2} e^4}{\pi^3 \hbar^6} \frac{m_s^{3/2} (kT)^{3/2}}{z^2} \frac{(\Delta + E_g)}{\Delta^2 E_g (3E_g + 2\Delta)} \exp \left(\frac{2\zeta_e}{kT} \right),$$

$$g(\alpha) = \frac{(1 - \mu^2) \alpha^2 \exp \left(\frac{\alpha^2}{m} - z^2 \right)}{(\alpha^2 + y^2 - 2\alpha y) \left[1 + \exp \left(\frac{\alpha^2}{m} - \frac{\zeta_e}{kT} \right) \right]},$$

$$q_\pm = \frac{1}{1 + M} [M y \mu \pm \sqrt{D}],$$

$$D = (\mu y M)^2 + (1 + M) [mS + z^2 (m - M) - 2M y (y + z\mu)],$$

$$M = \frac{m_e}{m_h}, \quad m = \frac{m_e}{m_s}, \quad S = \frac{\Delta - E_g}{kT}, \quad a_0^2 = \frac{\hbar^2}{2m_s kT r_D},$$

где r_D — радиус экранирования Дебая, m_e, m_h и m_s — массы электронов, тяжелых дырок и дырок в отщепленной зоне соответственно. В выражении (2) для q_\pm следует положить $q_- = 0$, если $M y \mu < \sqrt{D}$ и $q_+ = 0$, если $D < 0$.

Поскольку, как отмечалось выше, ζ_h связан с ζ_e уравнением нейтральности, уравнение (1) может быть решено относительно ζ_e при заданной скорости гене-

рации. Когда ζ_p найден, величина внутреннего квантового выхода ФЛ η определяется выражением

$$\eta = \frac{\gamma_{ph} n^2}{n^2 \left[\gamma_{ph} + R_{11} V_c F_{3,2} \left(\frac{\zeta_e}{kT} \right) + \frac{R_{17} V_c}{1 + \exp\left(\frac{-\zeta_e}{kT}\right)} \right] + G_{\infty}}. \quad (3)$$

Уравнение (1) решалось при различных значениях параметра x . При этом полагалось следующее.

а) Зависимость $E_g(x, T)$ определяется выражением из работы [5]

$$E_g = 1.59x - 0.25 + 5.233 \cdot 10^{-4} (1 - 2.08x) T + 0.327x^3.$$

б) Низкочастотная χ и высокочастотная ϵ_{∞} диэлектрические проницаемости определяются выражениями [6]

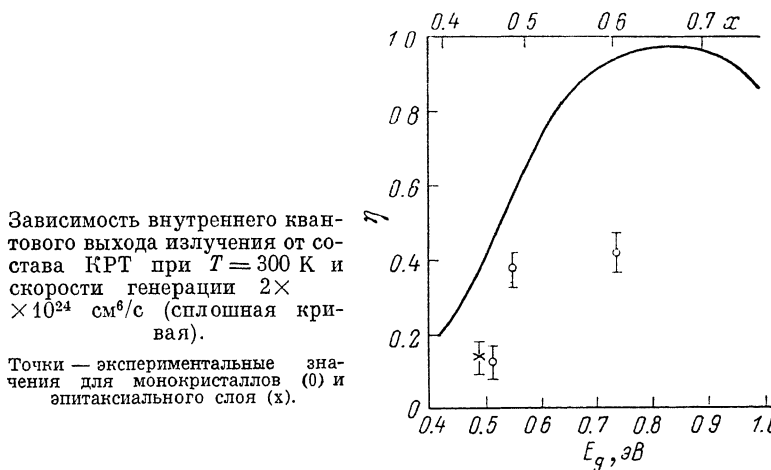
$$\chi = 20.5 - 15.6x + 5.7x^2, \quad \epsilon_{\infty} = 15.2 - 15.6x + 8.2x^2.$$

в) Эффективные массы электронов в зоне проводимости и дырок в отщепленной зоне определяются выражениями четырехзонной модели Кейна [7]

$$m_e^{-1} = \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right),$$

$$m_h^{-1} = \frac{2P^2}{3\hbar^2} \frac{1}{E_g + \Delta},$$

где P — матричный элемент оператора импульса между состояниями зоны проводимости и валентной зоны, $P = 8.3 \cdot 10^{-8}$ эВ·см [2]. Масса тяжелых дырок полагалась равной $m_h = 0.43m_0$ [2], где m_0 — масса свободного электрона.



Интеграл (2) вычислялся методом Монте-Карло для различных значений ζ_e с интервалом 0.1 при каждом заданном x . Затем при решении уравнения (1) значения интеграла для промежуточных ζ_e вычислялись кубической интерполяцией с использованием полученных массивов.

На рисунке сплошной линией представлена расчетная зависимость $\eta(x)$ при $T=300$ К для скорости генерации $G=2 \cdot 10^{24}$ см⁶/с, которая затем была достигнута в эксперименте. При этом значения концентрации $n=p$ составили $\sim 1 \cdot 10^{17}$ см⁻³. Из рисунка следует, что кривая $\eta(x)$ имеет максимум вблизи $E_g \sim 0.85$ эВ, что соответствует составу $x \sim 0.65$. Спад кривой в области меньших x обусловлен повышением эффективности оже-процессов ССНС и ССНЛ, а при $x > 0.65$ — оже-процесса СННС.

Экспериментальные значения внутреннего квантового выхода люминесценции в образцах с различным составом x определялись на основании измерения абсолютных значений интенсивности ФЛ. В основе работы измерительной установки лежала идея увеличения апертуры приемника до 180° при полной

концентрации излучения на его приемной площадке с помощью специальной оптической системы, описанной в работе [1]. Экспериментально определенная скорость генерации носителей заряда была равна $2 \cdot 10^{24}$ см⁶/с. Экспериментальные значения внутреннего квантового выхода измерены для четырех образцов сплавов КРТ различного состава. Три образца были выращены методом Бриджмена, один представлял собой эпитаксиальный слой (ЭС), полученный из раствора-расплава, обогащенного теллуром. Образцы характеризовались относительно высокой интенсивностью ФЛ. Концентрация дырок при $T=77$ К составляла: в ЭС — $1.8 \cdot 10^{16}$ см⁻³ ($x=0.46$), в кристаллах — $1.8 \cdot 10^{15}$ (0.47), $1 \cdot 10^{15}$ (0.48) и $5 \cdot 10^{13}$ (0.6) соответственно.

Экспериментальные значения внутреннего квантового выхода представлены на рисунке. Видно, что с ростом x экспериментальные значения η растут. В области меньших составов квантовая эффективность близка к расчетной, хотя и несколько меньше, а в кристалле с $x \sim 0.6$ составляет менее 50 % от расчетной, что, очевидно, связано с повышением относительной роли других механизмов рекомбинации, в частности рекомбинации Шокли—Рида, не учтенных при расчете. Известно, что в КРТ составов $x \sim 0.3$ имеются глубокие центры вблизи середины запрещенной зоны с сечением захвата, равным для электронов и дырок $\sigma \sim 10^{-16}$ см⁻² [8]. Предположив, что центры такого типа имеются и в КРТ больших составов, можно грубо оценить их концентрацию в наших образцах. Для этого в уравнение (1) следует добавить член $\sigma N_i n \langle v_r \rangle$, учитывающий рекомбинацию через центры с концентрацией N_i ($\langle v_r \rangle$ — средняя тепловая скорость носителей). Если сечения захвата электронов и дырок равны, то в стационарном случае скорости ухода носителей из зон проводимости и валентной равны и определяются носителями, имеющими большую эффективную массу, т. е. дырками. Взяв в качестве тепловой скорости тепловую скорость дырок, мы получили, что для совпадения эксперимента и расчета концентрация N_i должна составлять $(1-1.7) \cdot 10^{16}$ см⁻³ для всех образцов, кроме образца с $x=0.48$, для которого $N_i \sim 5 \cdot 10^{15}$ см⁻³. Такие величины являются разумными для концентрации центров в КРТ [8]. Можно полагать, что дальнейший прогресс в достижении максимально возможной интенсивности ИК излучения в приборах на основе КРТ заключается в уменьшении концентрации собственных дефектов, которые, как полагают авторы [2], ответственны за рекомбинацию Шокли—Рида.

Таким образом, величина квантовой эффективности в КРТ ($0.4 < x < 0.74$), обусловленная только межзонными механизмами рекомбинации, имеет при $T=300$ К максимум вблизи длины волны $\lambda \sim 1.5$ мкм, который связан с доминированием оже-механизмов рекомбинации ССНС и СННЛ при $x < 0.65$ и СННС при $x > 0.65$. Область максимума лежит в диапазоне длин волн, актуальном для волоконно-оптических линий связи, следовательно, твердые растворы КРТ являются перспективным материалом для создания оптоэлектронных приборов, работающих в данном диапазоне длин волн.

Авторы благодарят В. Б. Халфина за полезные замечания.

Список литературы

- [1] Баженов Н. Л., Гельмонт Б. Л., Иванов-Омский В. И., Ижнин А. И., Смирнов В. А. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 1. С. 93—97.
- [2] Любченко А. В., Сальков Е. А., Сизов Ф. Ф. Физические основы инфракрасной электроники. Киев, 1984. 256 с.
- [3] Lecoq G. P., Orsal B., Alabedra R. // IEEE J. Quant. Electron. 1987. V. QE-23. N 7. P. 1145—1154.
- [4] Гельмонт Б. Л., Соколова З. Н., Халфин В. Б. // ФТП. 1982. Т. 18. В. 10. С. 1803—1807.
- [5] Schmit J. L., Stelzer E. L. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. N 12. P. 4865—4869.
- [6] Bartoli F. J., Meyer J., Hoffman S. A., Allen R. E. // Phys. Rev. (B). 1983. V. 27. N 4. P. 2248—2263.
- [7] Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978. 616 с.
- [8] Polla D. L., Reine M. B. // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. N 8. P. 5132—5138.