

Вакансии ртути как двухвалентные акцепторы в структурах $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с квантовыми ямами

© Д.В. Козлов^{*,+}, В.В. Румянцев^{*,+}, С.В. Морозов^{*,+}, А.М. Кадыков^{*,■}, М.А. Фадеев^{*,+},
В.С. Варавин[•], Н.Н. Михайлов^{•♦}, С.А. Дворецкий[•], В.И. Гавриленко^{*,+}, Ф. Терре[■]

* Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

+ Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

• Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

♦ Новосибирский государственный университет,
630090 Новосибирск, Россия

■ Laboratoire Charles Coulomb (L2C), Université Montpellier II,
Montpellier, France

E-mail: dvkoz@ipmras.ru

(Получена 27 апреля 2016 г. Принята к печати 10 мая 2016 г.)

В спектрах фотопроводимости структур $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ (КРТ) с квантовыми ямами обнаружена длинноволновая полоса, образованная переходами между состояниями, связанными с валентной зоной. Был проведен расчет с учетом химического сдвига спектра энергетических состояний вакансий ртути в квантовых ямах КРТ структур. Показано, что наблюдаемая в спектрах фотопроводимости этих структур длинноволновая полоса связана с ионизацией двухвалентных акцепторных центров, которыми являются такие вакансии.

1. Введение

Твердые растворы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (КРТ) исследуются уже свыше четырех десятилетий и за эти годы накоплен огромный материал по технологии и свойствам соединений с долей Cd $x > 0.2$, так как они широко применяются для создания приемников и приемных матриц среднего инфракрасного (ИК) диапазона. В то же время продвижение таких структур в длинноволновую область спектра сдерживалось рядом технологических трудностей, в частности возникающими флуктуациями состава твердого раствора, которые при небольших x приводят к сильным флуктуациям ширины запрещенной зоны. В последние годы качество КРТ структур значительно улучшилось благодаря прогрессу в технологии роста. Молекулярно-лучевая эпитаксия КРТ материалов при низких температурах позволяет выращивать высококачественные эпитаксиальные структуры на основе КРТ с шириной запрещенной зоны меньше 100 мэВ, как объемные пленки, так и структуры с квантовыми ямами (КЯ). Повышенный интерес к структурам с КЯ на основе твердого раствора $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ вызван рядом их интересных свойств. В то время как CdTe имеет „нормальную“ зонную структуру, HgTe обладает так называемой инвертированной зонной структурой из-за сильного спин-орбитального взаимодействия. Тип зонной структуры квантовой ямы из „инвертированного“ материала с барьерами из „нормального“ материала зависит от ее ширины. Существует критическое значение толщины ямы, где ширина запрещенной зоны равна нулю. Яма с толщиной меньше критической имеет нормальную зонную структуру, а больше критической —

инвертированную. Возможность получения произвольной ширины запрещенной зоны вплоть до нуля делает эти структуры перспективными для применения в области дальней инфракрасной и терагерцовой оптоэлектроники, в частности для создания приемников среднего инфракрасного диапазона. Одной из проблем при создании приемников высокой чувствительности на основе КРТ является существенное влияние примесных и дефектных центров на времена межзонной релаксации. Однако в узкозонных структурах КРТ (с шириной запрещенной зоны < 100 мэВ) такие центры практически не изучены.

Известно, что наиболее распространенным акцептором в твердых растворах КРТ, из-за слабой связи $\text{Hg}-\text{Te}$, считается вакансия ртути [1]. Встраиваясь в кристаллическую решетку HgTe , ион ртути отдает в валентную зону два электрона. Тогда при наличии вакансии Hg в валентной зоне не достает двух электронов, т.е. каждая такая вакансия создает две дырки. При этом отсутствие иона ртути приводит к появлению добавки к периодическому потенциалу кристаллической решетки, которая в приближении эффективной массы описывается как потенциал точечного отрицательного заряда, по величине равного двум зарядам электрона, т.е. вакансия ртути описывается как двухвалентный акцептор.

Настоящая работа посвящена исследованию состояний вакансии ртути как двухвалентного акцептора в узкозонных структурах $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с КЯ. Были исследованы спектры ТГц ФП образцов, выращенных методом молекулярно-лучевой (МБЕ) эпитаксии. Для интерпретации экспериментальных данных был теоретически рассчитан спектр энергий двухзарядного акцептора в КРТ структурах с КЯ.

Параметры квантовых ям структур $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$ (013)

№ образца	Ширина ям	Доля кадмия	
		y (барьер)	x (яма)
091225-1	30 нм	0.72	0.138
100708-1	30 нм	0.65	0.154
100707-1	30 нм	0.7	0.166

2. Эксперимент

Исследуемые образцы были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs в кристаллографическом направлении (013). Последовательно выращивались буферный слой ZnTe, релаксированный буфер CdTe, нижний барьерный слой $Cd_yHg_{1-y}Te$, квантовая яма $Cd_xHg_{1-x}Te$, верхний барьер $Cd_yHg_{1-y}Te$ и покровный слой CdTe. Параметры выращенных структур представлены в таблице. Выращенные образцы имели электронный тип проводимости. Спектры ФП были измерены на фурье-спектрометре Bruker Vertex 80v [2] при температуре жидкого гелия. Исследуемый образец располагался в криостате замкнутого цикла Optistat AC-V, оптически сопряженном с фурье-спектрометром. В качестве источника возбуждающего излучения использовался глобар. При измерениях ФП излучение проходило через окно или из прозрачного полиэтилена, пропускающего ближнее ИК излучение, или из черного полиэтилена, пропускающего коротковолновое излучение глобара в видимой и ближней ИК областях. Отметим, что широкополосное излучение, пропускаемое полиэтиленовым окном, нарушает равновесное распределение носителей заряда по состояниям, вызывая переходы электронов между уровнями примесно-дефектных центров и континуумами (как валентной зоной, так и зоной проводимости).

На рис. 1 представлены измеренные спектры фотопроводимости структур $Cd_yHg_{1-y}Te/Cd_xHg_{1-x}Te$ с квантовыми ямами шириной 30 нм (другие параметры структур представлены в таблице), измеренные при использовании фильтров из черного полиэтилена. Положение красной границы межзонной ФП, определенное ранее в работе [3], показано стрелками. Следует отметить, что эта полоса оказывается изрезанной поглощением излучения в окне и фильтрах. Видно, что в спектрах образцов № 100707-1 и 100708-1 слева от межзонной полосы ФП наблюдается линия, соответствующая энергиям квантов возбуждения 20–35 мэВ. В спектре ФП самого узкозонного образца № 091225-1 наблюдаются две мощные полосы в области 8–35 мэВ, разделенные провалом в области 16 мэВ, обусловленным фоновым поглощением излучения в верхнем барьерном слое CdHgTe.

На рис. 2 представлены спектры более широкозонных структур № 100707-1 и 100708-1, измеренные с использованием прозрачного полиэтилена. Видно, что интенсивность слабой длинноволновой полосы около 20–35 мэВ в спектре образца № 100707-1, измеренном при использовании черного полиэтилена (рис. 1), при измерениях с использованием фильтра из прозрачного

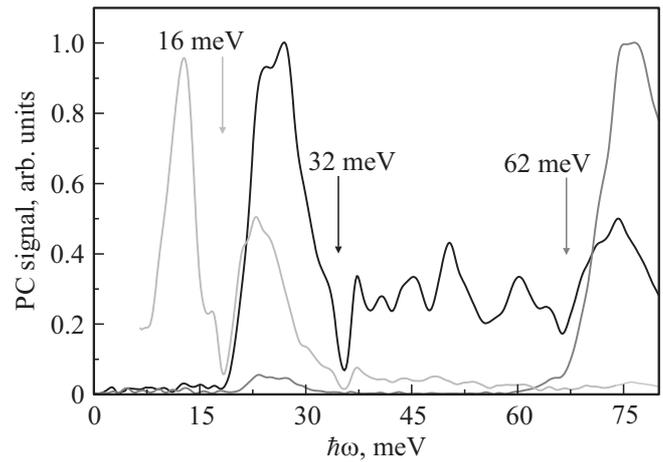


Рис. 1. Спектры ФП образцов $Hg, Te_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$, полученные при использовании в качестве окна криомагнитной вставки черного полиэтилена. Светло-серая линия — ФП образца № 092225, черная кривая — ФП структуры № 100708 и серая кривая — ФП образца № 100707. Стрелками отмечено положение красной границы межзонной ФП: светло-серая стрелка — красная граница межзонной ФП образца № 091225, черная стрелка — красная граница межзонной ФП образца № 100708 и серая стрелка — красная граница межзонной ФП образца № 100707.

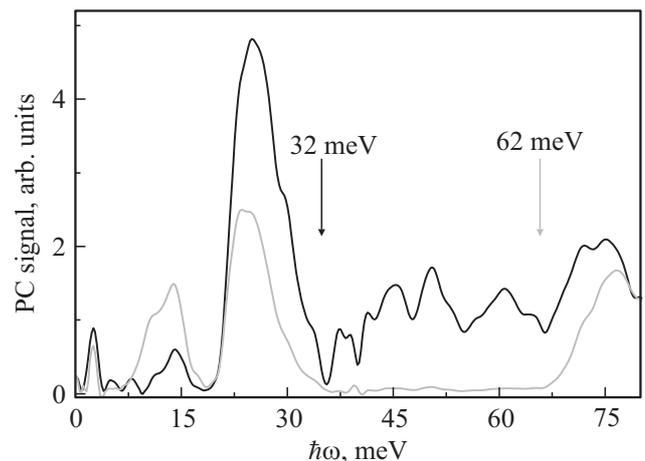


Рис. 2. Спектры ФП образцов $Hg, Te_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$, полученные при использовании в качестве окна криомагнитной вставки белого полиэтилена. Черная кривая — спектр ФП структуры № 100708, серая кривая — спектр ФП структуры № 100707. Стрелками отмечено положение красной границы межзонной ФП образцов № 100708 (черная стрелка) и № 100707 (серая стрелка).

полиэтилена резко возрастает относительно интенсивности межзонной ФП (см. рис. 2). При этом в спектре этой структуры появляется линия 8–16 мЭВ, аналогичная наблюдаемой в спектре структуры № 091225-1. В спектре образца № 100708-1 интенсивность длинноволновой полосы при использовании фильтра из прозрачного полиэтилена вместо черного меняется относительно межзонной ФП слабее, чем в спектре предыдущей структуры. В спектре этой структуры измеренном при использовании фильтра из прозрачного полиэтилена, также появляется линия 8–16 мЭВ.

Описанные особенности в спектрах широкозонных образцов № 100707-1 и 100708-1 оказываются левее красной границы межзонной полосы ФП, их естественно связать с переходами между энергетическими уровнями, находящимися в запрещенной зоне. Следует отметить, что донорные уровни в КРТ структурах отстоят от дна зоны проводимости на доли мЭВ и линии ФП, связанные с переходами с участием таких состояний, или сольются с межзонной полосой ФП (если переходы на такие уровни идут из валентной зоны), или будут соответствовать энергиям квантов возбуждения меньше 1 мЭВ (если переходы идут между донорными состояниями или с таких уровней в зону проводимости). Учитывая это, уровни в запрещенной зоне, переходы между которыми наблюдаются в спектре ФП, следует связать с акцепторами. В широкозонных структурах такие акцепторные состояния являются локализованными, и наблюдаемые при температуре жидкого гелия в спектрах фототока переходы с их участием — это переходы дырок с таких локализованных уровней в валентную зону. В узкозонном образце № 091225-1 акцепторные уровни могут оказаться, как и в узкозонных объемных КРТ структурах, в зоне проводимости [4] и таким образом, стать резонансными. Переходы на эти резонансные уровни должны наблюдаться на фоне полосы межзонной ФП, а не левее такой полосы. Следует отметить, что аналогичные „акцепторные“ полосы наблюдались и в спектре объемных КРТ структур [2,4], но в образцах с КЯ такие полосы оказываются шире.

Как было сказано выше, наиболее распространенным остаточным акцептором в КРТ структурах является вакансия ртути. Для интерпретации измеренных спектров ФП КРТ структур с КЯ был проведен расчет состояний этих вакансий.

3. Расчет состояний двухвалентного акцептора в КРТ структурах

Как было отмечено выше, вакансия ртути является двухвалентным акцептором. Двухвалентный акцептор может находиться в следующих зарядовых состояниях.

1) С акцепторным центром не связана ни одна дырка. В таком случае акцептор будет двукратно заряжен (A_2^{-2} -центр).

2) С акцепторным центром связана одна дырка. В этом случае акцептор заряжен однократно (A_2^{-1} -центр). При этом говорят об одночастичных состояниях.

3) С акцепторным центром связано две дырки. В этом случае мы имеем дело с нейтральным центром (A_2^0 -центр). Энергия состояния A_2^0 -центра складывается из энергий двух дырок, локализованных на таком центре. Основное состояние нейтрального акцептора реализуется, когда обе дырки находятся на нижнем уровне энергии.

Задача о двухчастичном состоянии на двузарядовом (двухвалентном) центре ранее решалась приближенными методами применительно к атому гелия [5]. Теоретическим исследованиям двойных (двухвалентных) акцепторов в полупроводниках с решеткой типа алмаза или цинковой обманки посвящено немного работ. Так, в работе [6] были изучены с помощью теории групп правила отбора для переходов между состояниями Zn в деформированном германии. Расчет состояний акцептора в материалах с кристаллической решеткой типа цинковой обманки осложняется тем, что приходится описывать состояния носителей вблизи края вырожденной зоны, а значит, решать не одно уравнение Шредингера, а систему дифференциальных уравнений для огибающих волновых функций. Известно, что рассчитанные в приближении эффективной массы состояния акцепторов не зависят ни от типа центра (дефект это ли примесь), ни от его химической природы (если это примесь). Однако, как показывают эксперименты, энергия основного состояния акцепторного центра может существенно зависеть от его природы. Величина такой поправки к энергии связи акцептора, называемая химическим сдвигом, может в несколько раз превышать энергию ионизации дырок на центре, рассчитанную в приближении эффективной массы.

Разница в энергиях связи для различных акцепторов в полупроводнике определяется химическим сдвигом, который складывается из следующих частей.

1) Во-первых, это отличие потенциала примеси от потенциала точечного заряда с постоянной диэлектрической проницаемостью, равной диэлектрической проницаемости полупроводника. Обычно такое отличие описывают, полагая потенциал примеси потенциалом точечного заряда с переменной диэлектрической проницаемостью, монотонно растущей от диэлектрической проницаемости вакуума вблизи иона акцептора до диэлектрической проницаемости полупроводника вдали от примеси [7]. Эта поправка к потенциалу примеси является знакопостоянной и отрицательной (притягивающий потенциал центральной ячейки).

2) Во-вторых, это деформационный потенциал, возникающий из-за смещения ее ионов вблизи атома примеси и возникновения вблизи акцепторного центра дополнительного наведенного заряда. Такой потенциал для дырок может быть как положительным (отталкивающим), если кристаллическая решетка вокруг акцептора

сжимается, так и отрицательным (притягивающим), если решетка растягивается [8]. К сжатию приводит встраивание в кристаллическую решетку атома с атомным номером, меньшим, чем замещаемый атом (например, если встраивается В на место атома Ge или Ве на место Ga в GaAs), к растяжению кристаллической решетки приводит встраивания элемента с большим атомным номером (например, In в Ge или Zn на место Ga).

Для вакансии ртути в КРТ, как и при встраивании „маленьких“ атомов примесей в полупроводниковые материалы, имеет место деформация сжатия кристаллической решетки вблизи центра. Как было отмечено выше, такая деформация приводит к возникновению „отталкивающего“ деформационного потенциала центральной ячейки для дырок и к уменьшению потенциала акцепторного центра вследствие сжатия кристаллической решетки около него. Эти факторы должны приводить к уменьшению энергии связи дырки на акцепторном центре.

Расчет как одночастичных, так и двухчастичных состояний проводился $k-p$ -методом. Гамильтониан уравнения для огибающих волновых функций дырок выбирался в виде суммы кинетической энергии (гамильтониан Латтинджера) и энергии кулоновского взаимодействия с заряженным акцептором, ограничивающего потенциала квантовой ямы и дополнительного отталкивающего потенциала, существенного вблизи примесного иона и описывающего деформационный потенциал центральной ячейки (ПЦЯ). Такой отталкивающий потенциал выбирали, аналогично [7], в виде экранированного кулоновского потенциала точечного заряда, причем величина такого заряда и длина экранировки являлись подгоночными параметрами. Использовалось аксиальное приближение, т.е. пренебрегали анизотропией закона дисперсии дырок в плоскости роста структуры, т.е. в плоскости, перпендикулярной кристаллографическому направлению (013). Для этого в элементах гамильтониана Латтинджера опущены слагаемые, ответственные за такую анизотропию. Значения параметров Латтинджера и диэлектрической проницаемости в твердом растворе находили с использованием линейной интерполяции между соответствующими значениями параметров в HgTe и CdTe [9]. При решении уравнения Шредингера с гамильтонианом Латтинджера не учитывалось влияние зоны проводимости на спектр акцепторов. Такое влияние невелико, поскольку плотность состояний в зоне проводимости КРТ структуры много меньше плотности состояний в валентной зоне. Влияние зоны проводимости на спектр акцепторов было оценено по теории возмущений в [4] при расчете энергий состояний двухвалентного акцептора в объемных КРТ структурах. Оказалось, что учет такого влияния приводит к изменению энергии основного одночастичного состояния дырки не более чем на 10%, а нижнего возбужденного не более чем на 3%.

При расчетах одночастичных состояний однократно ионизованного центра волновая функция акцептора раскладывалась в ряд по базису из огибающих волновых функций свободных дырок в квантовой яме, которые являются собственными функциями гамильтониана в отсутствие кулоновского потенциала. Подставляя такое разложение в уравнение эффективной массы, получаем интегральное уравнение для коэффициентов разложения, которое решали, заменяя интеграл дискретной суммой, как описано в [10].

При расчете двухчастичных состояний необходимо решать уравнение Шредингера для волновой функции двух дырок:

$$\left[H_L(\nabla_1) + H_L(\nabla_2) - \left(E + \frac{e^2 \left(Z - Z_1 \exp\left(-\frac{r_1}{\lambda}\right) \right)}{\kappa r_1} + \frac{e^2 \left(Z - Z_1 \exp\left(-\frac{r_2}{\lambda}\right) \right)}{\kappa r_2} - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) + V(z_1) + V(z_2) \right] \times \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0. \tag{1}$$

Здесь $H_L(\nabla_{1,2})$ — гамильтониан Латтинджера соответственно для первой и второй дырки, являющийся матрицей 4×4 ; $V(z_{1,2})$ — ограничивающий потенциал квантовой ямы для первой и второй дырок соответственно; Z_1 и λ — подгоночные параметры для потенциала, описывающего химический сдвиг; $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — четырехкомпонентная волновая вектор-функция двух частиц; $Z = 2$ — заряд акцепторного центра. Учитывая, что дырки являются фермионами и двухчастичная волновая функция должна менять знак при перестановке частиц, можно построить волновую функцию для двух дырок, находящихся в основном состоянии. Такие функции имеют вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_i(\mathbf{r}_1)\Psi_j(\mathbf{r}_2) - \Psi_i(\mathbf{r}_2)\Psi_j(\mathbf{r}_1)], \tag{2}$$

где $i, j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ — проекции полного момента для одночастичных функций, причем $i \neq j$. Функции $\Psi_{ij}(r_{1,2})$ ищем в виде разложения по базису из собственных вектор-функций дырок в квантовой яме в отсутствие акцептора ($\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$):

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,s} \int C_{n,s}(\mathbf{k}) G_i(n, s, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) d^2\mathbf{k} \tag{3}$$

где \mathbf{k} — двумерный волновой вектор дырки в плоскости КЯ, индекс n обозначает номер подзоны размерного квантования, $s = \pm 1$ — четность относительно отражения в плоскости, проходящей через вектор \mathbf{k} и нормаль k квантовой ямы. Из таких функций строим двухчастичную функцию и, подставляя ее в уравнение Шредингера,

получаем уравнение для коэффициентов разложения:

$$\begin{aligned}
 & [2E_{n'}(\mathbf{q}) - E]C_{n',s'}(q) \\
 & - \sum_{n,s} \int d^2\mathbf{k} C_{n,s}(\mathbf{k})\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k})\mathbf{G}^*(n', s', \mathbf{q}) \\
 & \times \frac{e^2}{\kappa|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2} \left(2Z - \sum_{m,s''} \int d^2\mathbf{k}' |C_{m,s''}(\mathbf{k}')|^2 \right) \\
 & - \sum_{n,s} \int d^2\mathbf{k} C_{n,s}(\mathbf{k})\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k})\mathbf{G}^*(n', s', \mathbf{q}) \\
 & \times \frac{2Z_1 e^2}{\kappa(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2 + \frac{1}{\lambda^2})} = 0. \tag{4}
 \end{aligned}$$

Интегральное нелинейное уравнение (4) решали методом последовательных приближений. Схема итераций была построена следующим образом:

$$\begin{aligned}
 & [2E_{n'}(\mathbf{q}) - E]C_{n',s'}^{(l)}(q) \\
 & - \sum_{n,s} \int d^2\mathbf{k} C_{n,s}^{(l)}(\mathbf{k})\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k})\mathbf{G}^*(n', s', \mathbf{q}) \\
 & \times \frac{e^2}{\kappa|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2} \left(2Z - \sum_{m,s''} \int d^2\mathbf{k}' |C_{m,s''}^{(l-1)}(\mathbf{k}')|^2 \right) \\
 & + \sum_{n,s} \int d^2\mathbf{k} G_{n,s}(\mathbf{k})\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k})\mathbf{G}^*(n', s', \mathbf{q}) \\
 & \times \frac{2Z_1 e^2}{\kappa(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2 + \frac{1}{\lambda^2})} = 0, \tag{5}
 \end{aligned}$$

где l — номер шага итераций. На каждом шаге значения коэффициентов разложения $C_n(\mathbf{k})$ были рассчитаны путем замены интегралов дискретными суммами. В качестве первого шага были найдены энергии и волновые функции дырок, без учета взаимодействия между носителями, являющиеся решением уравнения:

$$\begin{aligned}
 & [2E_{n'}(\mathbf{q}) - E]C_{n',s'}(q) \\
 & - \sum_{n,s} \int d^2\mathbf{k} C_{n,s}(\mathbf{k})\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k})\mathbf{G}^*(n', s', \mathbf{q}) \frac{e^2}{\kappa|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2} 2Z \\
 & + \sum_{n,s} \int d^2\mathbf{k} C_{n,s}(\mathbf{k})\mathbf{G}(n, s, \mathbf{k})\mathbf{G}^*(n', s', \mathbf{q}) \\
 & \times \frac{2Z_1 e^2}{\kappa(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2 + \frac{1}{\lambda^2})} = 0. \tag{6}
 \end{aligned}$$

Для расчета двухчастичных состояний, в котором одна дырка находится на основном уровне энергии, а вторая на возбужденном, был использован метод самосогласованного поля Хартри [3]. Рассматривалось состояние частицы в поле примесного центра и другой

частицы, при этом решались одночастичные уравнения Шредингера для каждой из двух дырок:

$$\begin{aligned}
 & \left[H_L(\nabla_1) + V(z_1) - \left(E_1 + \frac{e^2(Z - Z_1 \exp(-\frac{r_1}{\lambda}))}{\kappa r_1} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{|\Psi_2(\mathbf{r}_2)|^2 d^3\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \right] \Psi_1(\mathbf{r}_1) = 0, \\
 & \left[H_L(\nabla_2) + V(z_2) - \left(E_2 + \frac{e^2(Z - Z_1 \exp(-\frac{r_2}{\lambda}))}{\kappa r_2} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{|\Psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 d^3\mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \right] \Psi_2(\mathbf{r}_2) = 0, \tag{7}
 \end{aligned}$$

Здесь $E_{1,2}$ и $\Psi_{1,2}(\mathbf{r}_{1,2})$ — энергии и волновые вектор-функции первой и второй дырок соответственно. Представляя каждую волновую функцию в виде разложения (3) и подставляя эти разложения в систему (7), получим интегральные уравнения для коэффициентов разложения, которые решали методом последовательных приближений, описанном выше для расчета основного состояния нейтрального центра. Отметим, что полная энергия системы двух частей равна сумме E_1 и E_2 .

Изложенный выше теоретический метод позволил определить энергии и волновые функции состояний акцепторов в исследуемых структурах с КЯ.

4. Результаты расчета и обсуждение

На рис. 3 представлены зависимости энергии частичной ионизации (отрыва первой дырки) нейтрального двухвалентного акцепторного A_2^0 центра (сплошные линии) и энергии полной ионизации центра A_2^{-1} (пунктирные линии) от положения акцепторного центра в КЯ структуры $Hg_yTe_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$ с составом, приближенным к составу исследуемых КРТ структур. Отметим, что энергия связи акцепторов, помещенных в КЯ КРТ структур, при изменении доли кадмия в яме в диапазоне от 0.135 до 0.17 и в барьере от 0.65 до 0.75 меняется меньше чем на 1%. Серые линии представляют энергии ионизации A_2^0 и A_2^{-1} центров, рассчитанные без учета деформационного „химического“ сдвига, черные линии — энергии ионизации акцепторных центров, рассчитанные с учетом „химического“ сдвига, т.е. при добавлении потенциала центральной ячейки с подгонными параметрами, которые выбирались так, чтобы достичь согласия положения наблюдаемых линий в спектре фототока с рассчитанными энергиями переходов между состояниями вакансий ртути. Оказалось, что подобранные для наилучшего согласия энергий связи акцепторных центров с положением линий ФП КРТ структур с КЯ подгонные параметры ПЦЯ дают также наилучшее согласие энергий ионизации вакансий ртути с положением линий ФП в объемных КРТ структурах.

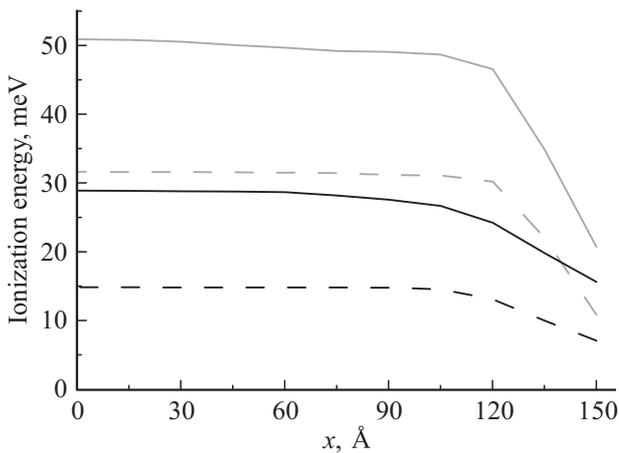


Рис. 3. Энергии частичной ионизации (отрыва первой дырки) нейтрального двухвалентного акцепторного A_2^0 центра (сплошные линии) и энергии полной ионизации частично ионизованного центра A_2^{-1} (пунктирные линии) в зависимости от расстояния от акцепторного центра до середины КЯ структуры $Hg_xTe_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x = 0.7$, $y = 0.15$, ширина КЯ $d_{QW} = 30$ нм). Серые линии представляют энергии ионизации A_2^0 и A_2^{-1} центров рассчитанные без учета деформационного химического сдвига, черные линии — энергии ионизации акцепторных центров, рассчитанные с учетом химического сдвига, с подгонными параметрами потенциала центральной ячейки $\left(\frac{Z_1 e^2 \exp(-\frac{r}{\lambda})}{\kappa r}\right)$: $Z_1 = 1.3$, $\lambda = 0.3$ нм.

На рис. 3 видно, что рассчитанная с учетом химического сдвига энергия ионизации A_2^0 центра меняется от 15 мэВ для акцептора в центре КЯ до 7 мэВ для акцептора на гетерогранице, а энергия полной ионизации A_2^{-1} центра меняется от 28 мэВ для акцептора в центре КЯ до 14 мэВ для акцептора на гетерогранице. При этом энергии ионизации начинают меняться только при приближении центра к гетерогранице на расстояние, меньшее 30 Å. Таким образом, если вакансии ртути равномерно распределены по слою КЯ структуры, большая часть акцепторных центров имеет энергии ионизации соответствующие энергиям ионизации акцепторов в центре КЯ, т.е. 28 мэВ для ионизации A_2^{-1} и 15 мэВ для A_2^0 центра. Отметим, что акцепторные центры, помещенные в барьеры, создают для дырок притягивающий потенциал в слоях квантовых ям. Такой потенциал приводит к появлению мелких состояний, образованных дырками в КЯ, связанных с акцепторами, находящимися в барьере. Энергия связи таких состояний убывает при удалении акцепторного центра от гетерограницы.

Сигнал ФП возникает из-за ионизации излучением заселенных дырками акцепторных уровней. Переходы в спектре A_2^0 и A_2^{-1} центров формируют полосу, соответствующую энергиям фотонов 8–35 мэВ, наблюдаемую в спектрах ФП изучаемых структур. Так, энергия ионизации A_2^{-1} центра, помещенного в середину квантовой ямы (28 мэВ), хорошо согласуется с положением максимума коротковолновой части такой полосы ФП

(20–35 мэВ, см. рис. 1, 2). Энергии ионизации A_2^0 центра (7–15 мэВ) совпадают с положением длинноволновой части наблюдаемой полосы ФП (8–16 мэВ, см. рис. 1, 2). Форма полос ФП и протяженность длинноволнового и коротковолнового краев таких полос определяются различными факторами.

Во-первых, коротковолновый край такой полосы, называется, формируется переходами дырок с основного уровня в непрерывный спектр, которые разрешены при энергии кванта возбуждающего излучения большей энергии ионизации центра. Вероятность такого перехода медленно падает с ростом частоты излучения, т.е. „глубины заброса“ носителя в континуум. На рис. 1, 2 видно, что ширина коротковолнового спадающего участка полос ФП изучаемых образцов составляет около 7 мэВ. Следует отметить, что излучение с энергией квантов около 32–36 мэВ из-за возбуждения оптических фононов интенсивно поглощается в подложке из GaAs. Это приводит к сильному уменьшению интенсивности возбуждающего излучения, и спаду ФП на таких частотах, и, следовательно, к более резкому „обрыву“ коротковолнового края полосы ФП 20–35 мэВ.

Во-вторых, длинноволновый край линий ФП уширяется из-за зависимости энергии ионизации акцепторов от положения центра. Максимум ФП соответствует переходам в спектре акцептора, помещенного далеко от гетерограницы в квантовую яму. Переходы в спектре акцепторного центра расположенного вблизи гетероинтерфейса, формируют длинноволновый край полос ФП.

Отметим, что исследуемые образцы имеют проводимость n -типа, т.е. уровень Ферми в таких структурах оказывается вблизи края зоны проводимости. Ширина запрещенной зоны, определенная по красной границе межзонной ФП в образцах, составляет 16 мэВ для структуры № 091225-1, 32 мэВ для образца № 100708-1 и 62 мэВ для структуры № 100707-1. Следует отметить, что ширина запрещенной зоны оказывается сравнимой с энергиями ионизации акцепторных центров (см. рис. 2), а значит, уровень Ферми, находящийся вблизи края зоны проводимости, находится также вблизи уровней акцепторов. При этом уровень Ферми по отношению к акцепторным уровням может оказываться в следующих позициях.

1. Уровень Ферми расположен в запрещенной зоне ниже энергии связи A_2^0 центра. В таком случае в образце при $T = 0$ К будут присутствовать только нейтральные A_2^0 . При этом в спектре ФП, измеренном при использовании фильтра из черного полиэтилена (т.е. в ситуации термодинамического равновесия), должна наблюдаться полоса, соответствующая энергиям квантов около 7–15 мэВ, и отсутствовать полоса около 15–35 мэВ.

2. Уровень Ферми совпадает с энергией связи A_2^0 центра. Отметим, что такое положение уровня Ферми возможно в образце № 091225-1. В таком случае в образце будут присутствовать как нейтральные A_2^0 , так и частично ионизованные A_2^{-1} центры. При этом в

спектре ФП при термодинамическом равновесии должна присутствовать полоса от 7 до 35 мЭВ, связанная с ионизацией и A_2^0 , и A_2^{-1} центров, что и наблюдается в спектре структуры № 091225-1 при измерениях с черным полиэтиленом.

3. Уровень Ферми расположен выше энергии связи A_2^0 центра, но ниже основного уровня A_2^{-1} центра. В этом случае в образце при $T = 0$ К отсутствуют нейтральные центры. При этом в спектрах ФП, измеренных с фильтром из черного полиэтилена, должна присутствовать полоса, соответствующая энергиям квантов около 16–35 мЭВ, и отсутствовать более длинноволновая фотопроводимость. При этом при использовании фильтра из прозрачного полиэтилена, т.е. в условиях нарушающей термодинамическое равновесие фоновой подсветки, появляется длинноволновая полоса, связанная с ионизацией более мелких состояний A_2^0 центров. Это наблюдается в измеренных спектрах структуры № 100708-1.

4. Уровень Ферми расположен выше основного уровня A_2^{-1} центра. В этом случае в образце при $T = 0$ К присутствуют только полностью ионизованные двукратно-заряженные A_2^{-2} центры. При конечной температуре, если уровень Ферми оказывается близко по энергии к основному уровню A_2^{-1} центра, в структуре присутствует небольшое количество A_2^{-1} центров. Такие A_2^{-1} центры также возникают при наличии фоновой подсветки. В этом случае при использовании фильтра из прозрачного полиэтилена вместо черного фоновая подсветка приводит к заселению дырками акцепторных уровней, концентрация A_2^{-1} и A_2^0 центров возрастает и резко возрастает интенсивность наблюдаемой слабой длинноволновой полосы фототока относительно межзонной ФП. Это наблюдается в измеренных спектрах структуры № 100707-1.

5. Заключение

В спектрах фотопроводимости структур $Hg_yTe_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) с квантовыми ямами обнаружены длинноволновые полосы фотоотклика, связанные с переходами между состояниями, связанными с валентной зоной. Расчет спектра энергий состояний вакансий ртути в КЯ КРТ структур показывает, что обнаруженные длинноволновые полосы ФП связаны с ионизацией таких акцепторных центров.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты # 14-02-01229, 16-32-60172) и Министерством образования и науки РФ (грант МК-6923.2016.2).

Список литературы

- [1] Lischka K. *Physica Status Solidi B*, **133** (1), 17 (1986).
- [2] V.V. Rumyantsev, S.V. Morozov, A.V. Antonov, M.S. Zholudev, K.E. Kudryavtsev, V.I. Gavrilenko, S.A. Dvoretzkii, N.N. Mikhailov. *Semicond. Sci. Technol.*, **28**, 125007 (2013).
- [3] В.В. Румянцев, А.В. Иконников, А.В. Антонов, С.В. Морозов, М.С. Жолудев, К.Е. Спирин, В.И. Гавриленко, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов. *ФТП*, **47**, 1446 (2013).
- [4] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, В.С. Варавин, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, Ф. Терре. *ФТП*, **49** (12), 1654 (2015).
- [5] Г. Бете, Э. Солпитер. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М., Физматлит, 1960).
- [6] E. Kartheuser, S. Rodriguez. *Phys. Rev. B*, **8** (4), 1556 (1973).
- [7] A. Baldereshi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **8** (6), 2697 (1973).
- [8] O. Drachenko, D.V. Kozlov, V.I. Gavrilenko, H. Schneider, M. Helm, J. Wosnitza, J. Leotin. *Phys. Rev. B*, **84**, 245205 (2011).
- [9] E.G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C.R. Becker, G. Landwehr. *Phys. Rev. B*, **72**, 03532 (2005).
- [10] В.Я. Алешкин, Б.А. Андреев, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов. *ФТП*, **34** (5), 582 (2000).

Редактор Г.А. Оганесян

Mercury vacancies as double acceptors in $Hg_yTe_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$ structures with quantum wells

D.V. Kozlov^{*+}, V.V. Rumyantsev^{*+}, S.V. Morozov^{*+}, A.M. Kadykov^{*■}, M.A. Fadeev^{*+}, V.S. Varavin[•], N.N. Mihajilov^{♦♦}, S.A. Dvoretzky^{♦♦}, V.I. Gavrilenko^{*+}, F. Terpe[■]

* Institute for Physics of Microstructures
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorod, Russia
+ Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia
• Institute for Physics
of Semiconductors Siberian Branch
of Russian Academy of Sciences,
630090 Novosibirsk, Russia
♦ State University of Novosibirsk,
630090 Novosibirsk, Russia
■ Laboratoire Charles Coulomb (L2C),
Universite Montpellier II,
Montpellier, France

Abstract The long-wavelength band bound with transition between the states deals to valence band, was found in photoconductivity spectra of $Hg_yTe_{1-y}/Cd_xHg_{1-x}Te$ structures with quantum wells. The calculation for the energy spectra of mercury vacancies taking into account the central cell correction was made. It was shown, that long-wavelength band, observed in photoconductivity spectra of structures bound with the ionization of bivalent acceptors centre, which are such vacancies.