

Легкие и тяжелые экситоны в напряженных квантовых ямах CdTe/CdZnTe

© Л.В. Котова^{1,2}, Д.Д. Белова¹, R. Andre³, H. Mariette^{3,4}, В.П. Кочерешко¹

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт Петербург, Россия

² Университет ИТМО, 197101 Санкт Петербург, Россия

³ Institut Neel CNRS, F-38000 Grenoble, France

⁴ Japanese-French laboratory for Semiconductor Physics and Technology J-F AST, CNRS, Universite Grenoble Alpes, University of Tsukuba, Japan

E-mail: kotova@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 17 апреля 2023 г.

В окончательной редакции 21 апреля 2023 г.

Принята к публикации 21 апреля 2023 г.

Исследованы спектры фотолюминесценции и поляризованного отражения при нормальном и наклонном падении света от структур с квантовыми ямами с симметричными Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te/CdTe/Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te и асимметричными Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te/CdTe/Cd_{0,4}Mg_{0,6}Te барьерами. Из-за механических напряжений, вызванных рассогласованием кристаллических решеток ям и барьеров, энергия легких дырок в квантовых ямах была выше, чем в барьерах, т.е. для них структура зон имела тип II. Однако в спектрах отражения линии тяжелых и легких экситонов имели сравнимую интенсивность. В структурах с симметричными барьерами в спектрах отражения обнаружены экситонные резонансы не проявляющиеся в спектрах фотолюминесценции. Проведен детальный расчет уровней энергии и спектров отражения.

Ключевые слова: квантовая яма, отражение, экситоны, деформация.

DOI: 10.21883/FTP.2023.03.55628.4803

1. Введение

Полупроводники A^{II}B^{VI}, такие как CdTe и ZnTe, часто используются для фундаментальных исследований как модельные объекты. До недавнего времени их практическое применение было весьма ограничено. Они в основном использовались в качестве детекторов рентгеновского излучения и люминофоров. В то же время они обладают высоким структурным совершенством и уникальными оптическими свойствами. В последние годы соединения A^{II}B^{VI} все больше рассматриваются как материалы для использования в солнечной энергетике [1]. Они обладают высоким квантовым выходом в зеленой области спектра и представляются очень перспективными для преобразования солнечной энергии в электрическую.

Одной из причин, затрудняющих практическое использование гетероструктур на основе соединений CdTe и ZnTe, является заметное несоответствие их кристаллических решеток. В результате на границах раздела возникают механические напряжения, которые могут приводить к разрушению структуры. Из-за несовпадения решеток величина разрыва зон известна довольно приблизительно. Так, разброс опубликованных данных о разрыве зон в валентной зоне гетероструктур CdTe/ZnTe достигает ±10% от средней ширины запрещенной зоны [2].

Полный разрыв зон складывается из химического разрыва зон, который определяется химической струк-

турой границы раздела, и деформационного разрыва зон, который связан с упругой энергией на границе раздела между контактирующими материалами. В соответствии с правилом „общий анион/катион“ в структурах с общим анионом разрыв зон в валентной зоне должен быть небольшим по сравнению с разрывом зон в зоне проводимости. Деформация может сильно изменить химический разрыв зон и даже привести к образованию структуры II типа. В этом случае главным вкладом в потенциальную энергию дырки становится ее кулоновское взаимодействие с электроном.

В данной работе проведено подробное экспериментальное исследование спектров фотолюминесценции и поляризованного отражения от структур с квантовыми ямами с симметричными и асимметричными барьерами, когда движение дырок определяется их кулоновским взаимодействием с электроном „запертым“ в квантовой яме (КЯ).

2. Эксперимент

Исследовались структуры на основе CdTe/Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te с одиночными квантовыми ямами шириной 8 нм, выращенные методом молекулярно-пучковой эпитаксии в направлении [001]. Был изготовлен набор таких структур с симметричными и асимметричными барьерами. В первом случае квантовая яма была окружена симметричными барьерами с составом Zn 10% с обеих сторон, а

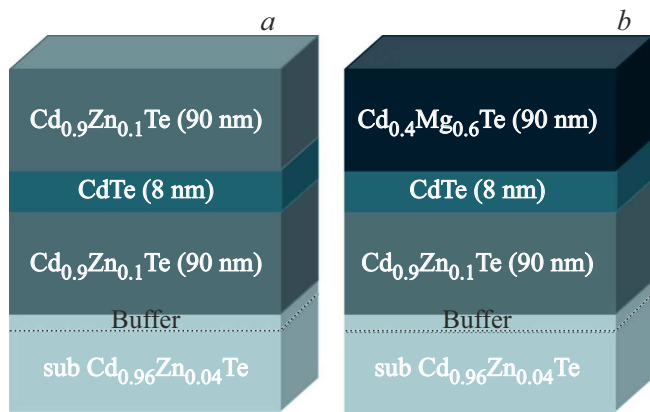


Рис. 1. Схема исследованных структур: *a* — структура с одиночной квантовой ямой CdTe шириной 8 нм и симметричными барьерами Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te шириной 90 нм. *b* — структура с одиночной квантовой ямой CdTe шириной 8 нм и асимметричными барьерами Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te и Cd_{0,4}Mg_{0,6}Te шириной 90 нм каждый. Буферный слой с содержанием Zn 10% имел толщину порядка 1 мкм.

во втором случае один из барьеров был такой же, как в симметричной структуре, а другой барьер был на основе Cd_{0,4}Mg_{0,6}Te (рис. 1). Высота этих барьеров отличалась более чем в 2 раза. Параметры структуры приведены в подписи к рис. 1. Для буферного слоя в обоих случаях использовался Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te толщиной 1000 нм. Подложки имели состав Zn 4%. Благодаря буферному слою большой толщины барьерные слои оказывались ненапряженными и все механические напряжения прикладывались к квантовой яме.

Спектры снимались с помощью монохроматора с фокусным расстоянием 0.5 м и регистрировались CCD детектором. В качестве источника света для регистрации спектров пропускания и отражения использовалась галогеновая лампа, а для возбуждения спектров фотолуминесценции (ФЛ) использовался лазер с длиной волны излучения 533 нм.

На рис. 2, *a* и *b* представлены спектры ФЛ структур с симметричными и асимметричными барьерами соответственно. На рис. 2, *c* и *d* представлены спектры отражения этих структур. Стоксов сдвиг между спектральными особенностями в спектрах отражения и ФЛ был мал, что указывает на высокое качество этих структур. Обращает на себя внимание то, что как в спектрах отражения, так и в спектрах ФЛ наблюдается слишком много линий для одиночной, не глубокой квантовой ямы.

Сравнивая спектры отражения и ФЛ симметричных структур (рис. 2, *a* и *c*), можно видеть, что некоторые резонансные особенности присутствуют в спектрах отражения и отсутствуют в спектрах ФЛ. Обычно бывает как раз наоборот, когда спектральная линия присутствует в спектрах ФЛ и отсутствует или слаба в спектрах отражения, что связано с быстрой релаксацией носителей вниз по энергии. В структуре с симметричными барьерами (рис. 2, *c*) в спектре отражения имеется яркая

особенность на энергии 1.618 эВ, которая отсутствует в спектре ФЛ (рис. 2, *a*). Это можно объяснить только тем, что при нерезонансном фотовозбуждении носители не могут попасть в это состояние и не могут участвовать в ФЛ, но при этом сила осциллятора прямого оптического перехода в это состояние достаточно велика. В асимметричной структуре аналогичная линия в спектре ФЛ присутствовала. Это связано с „отталкиванием“ носителей от высокого барьера в яму.

Наиболее интенсивными линиями в спектре ФЛ являются линии на энергиях 1.596 и 1.608 эВ, интенсивность остальных особенностей заметно меньше. Это указывает на то, что из этих состояний затруднена релаксация в состояния, низшие по энергии, и все фотовозбужденные носители излучаются именно через эти состояния.

Для первоначальной идентификации линий в спектре отражения воспользуемся результатом работы [3], в которой анализировалась форма контура экситонного отражения. В этой работе было показано, что форма контура экситонного отражения определяется интерференцией света, отраженного от поверхности и от квантовой ямы. В зависимости от набега фазы при прохождении света от поверхности до квантовой ямы и обратно форма спектра может сильно изменяться. В спектре отражения симметричной структуры (рис. 2, *a*) видно, что контур экситонного отражения от поверхности структуры на энергии 1.626 эВ имеет „дифференциальную“ форму с максимумом на энергии 1.624 эВ и минимумом на энергии 1.628 эВ. Особенности спектров отражения на энергиях 1.597, 1.602, 1.609 и 1.620 эВ имеют „противоположную“ форму с минимумом на низких энергиях и максимумом на более высоких.

Аналогичная процедура проделана и для идентификации спектров асимметричной структуры. Это позволяет идентифицировать спектральные особенности на энергиях 1.601, 1.604, 1.612 и 1.620 эВ как относящиеся к квантовой яме. Для более надежной идентификации наблюдаемых оптических переходов нами были проведены теоретические расчеты энергий экситонных состояний.

3. Теория

Оценим положение линий легких и тяжелых экситонов в этой структуре. Постоянные решетки в материалах Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te и CdTe различаются на ~ 0.5%. В результате в дополнение к потенциалу, связанному с так называемым химическим разрывом зон между контактируемыми материалами, на носители действует потенциал, связанный с деформационным разрывом зон. Величина химического разрыва зон в валентной зоне гетероструктур CdTe–CdZnTe известна очень приблизительно и считается лежащей в интервале от –10 до +10% от полного разрыва зон [4,5]. Ширины запрещенных зон при температуре 77 К ненапряженных материалов составляют $E_g^{\text{CdTe}} = 1.576$ эВ, $E_g^{\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}} = 1.638$ эВ, $E_g^{\text{Cd}_{0,4}\text{Mg}_{0,6}\text{Te}} = 2.7$ эВ [6].

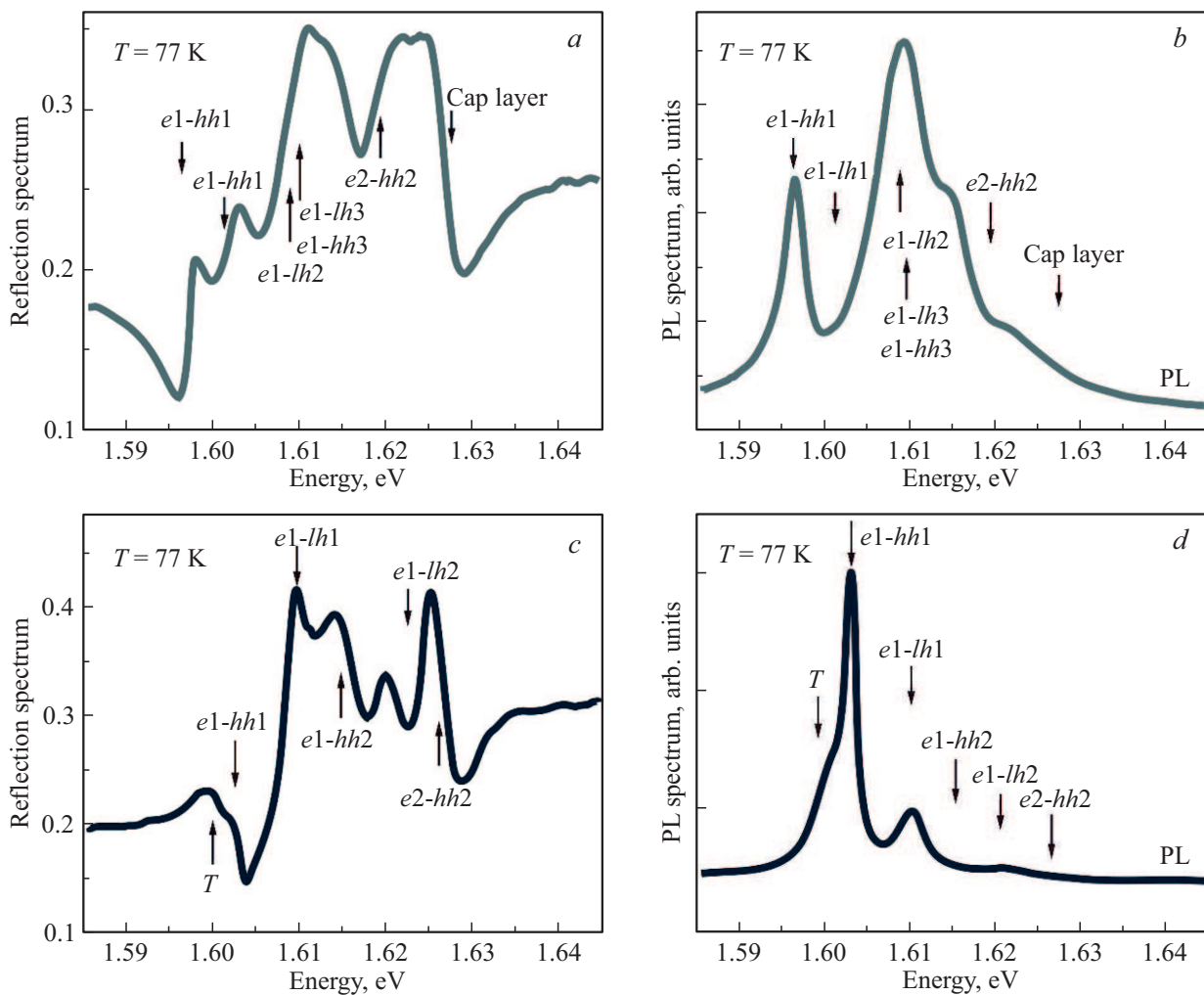


Рис. 2. Спектры отражения (a и c) и спектры фотолюминесценции (b и d) структур с квантовыми ямами с симметричными (a и b) и асимметричными (c и d) барьерами, снятые при температуре 77 К. Стрелками показаны оптические переходы в экситонные состояния с тяжелыми (hh) и легкими (lh) дырками. Идентификация этих переходов выполнена на основе расчетов и подробно описана в разд. Обсуждение результатов.

Величина полного химического разрыва зон равна разнице ширин запрещенных зон объемных материалов $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ и CdTe : $\Delta = E_g^{\text{ZnTe}} - E_g^{\text{CdTe}} = 0.065$ эВ [6–8]. Это значение делится между зоной проводимости (Δ_c) и валентной зоной (Δ_v), $\Delta = \Delta_c + \Delta_v$. В данной работе мы предполагаем, что $\Delta_c = 0.9\Delta$ и $\Delta_v = 0.1\Delta$ [9]. Поскольку буферный слой и барьерные слои гораздо толще слоя квантовой ямы, можно предположить, что эти слои не напряжены, а все механические напряжения сосредоточены в яме. Деформационный разрыв зон можно рассчитать по формулам (1) [10,11]:

$$\begin{aligned} \Delta E_c &= 2a_c(S_{11} + 2S_{12})\sigma, \\ \Delta E_{hh} &= 2a_v(S_{11} + 2S_{12})\sigma + b(S_{11} - S_{12})\sigma, \\ \Delta E_{lh} &= 2a_v(S_{11} + 2S_{12})\sigma - b(S_{11} - S_{12})\sigma. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ΔE_c — деформационный разрыв зон в зоне проводимости, ΔE_{hh} — деформационный разрыв зон в

зоне тяжелых дырок, ΔE_{lh} — деформационный разрыв зон в зоне легких дырок, a_c и a_v — потенциалы гидростатической деформации в зонах проводимости и валентной зоне, b — потенциал одноосной деформации, $S_{ij} \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{Н}$ — упругие постоянные,

$$\sigma = \frac{\varepsilon}{(S_{11} + S_{12})}$$

— механическое натяжение в плоскости,

$$\varepsilon = \frac{a_j^L - a_i^L}{a_i^L}$$

— деформация в плоскости. Для потенциалов деформации справедливы соотношения [10]:

$$a = a_c - a_v, \quad \frac{a_c}{a_v} = -2.$$

Величины этих параметров приведены в табл. 1.

Таблица 1. Деформационные потенциалы и упругие постоянные в CdTe

S_{11}	S_{12}	a , эВ	b , эВ	σ
3.581	-1.394	-3.85	-1.20	0.00273

Используя формулу (1), мы получаем, что деформационный разрыв зон в зоне проводимости $\Delta E_c = 11$ мэВ, деформационный разрыв зон в подзоне тяжелых дырок $\Delta E_{hh} = 10.7$ мэВ, деформационный разрыв зон, в подзоне легких дырок $\Delta E_{lh} = -21.8$ мэВ.

Деформационный разрыв зон суммируется с химическим разрывом зон. Таким образом, благодаря деформации для легких дырок получаем гетероструктуру типа II, а для тяжелых - структуру типа I. В результате полный разрыв в структуре CdZnTe/CdTe/CdZnTe в зоне проводимости CBO = 48 мэВ, в валентной зоне тяжелых дырок VBO $hh = 4.24$ мэВ и VBO $lh = -15.34$ мэВ. Разрыв зон на интерфейсе CdTe/CdMgTe достигает нескольких сотен мэВ.

Поскольку величина полного разрыва зон в валентной зоне исследуемой структуры мала, их кулоновское взаимодействие с электроном становится основным вкладом в потенциальную энергию дырок [12].

Мы предполагаем, что электрон и дырка квантуются в потенциальных ямах для электрона и дырки, образованных в результате разрыва зон между слоями CdTe и CdZnTe и связаны друг с другом кулоновским взаимодействием. Уравнение Шредингера для экситона в этом случае имеет вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V(Z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V(z_h) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + |z_e - z_h|^2}} \right] \times \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \left(E - \frac{\hbar^2 Q_{\perp}^2}{2M} \right) \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h). \quad (2)$$

Здесь

$$\phi = \arctg\left(\frac{y_e - y_h}{x_e - x_h}\right), \quad \rho = \sqrt{|x_e - x_h|^2 + |y_e - y_h|^2},$$

$V(z_e)$ — прямоугольный потенциал для электронов, $V(z_h)$ — прямоугольный потенциал для дырок, $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$ — приведенная масса, $M = m_e + m_h$ — трансляционная масса экситона, ε — статическая диэлектрическая проницаемость материала КЯ, Q_{\perp} — волновой вектор центра масс экситона в плоскости КЯ, E — полная энергия экситона, отсчитанная от дна КЯ.

Для приближенного решения уравнения (2) воспользуемся идеей статьи [12]. Считая движение электрона в квантовой яме „быстрой“ подсистемой, найдем средний

потенциал, действующий на дырку со стороны электрона. Для этого разделим уравнение (2) на две части:

$$\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_e(Z_e) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon \rho} \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_h(Z_h) + \frac{e^2}{\varepsilon \rho} - \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + |z_e - z_h|^2}} \right] \right\} \times \Psi(z_e, z_h, \rho, \phi) = E \Psi(z_e, z_h, \rho, \phi). \quad (3)$$

Будем рассматривать гамильтониан в первой квадратной скобке как гамильтониан „быстрой“ подсистемы. Переменные в первой квадратной скобке разделяются и собственные функции этого гамильтониана имеют вид

$$\Phi_{n,m,l}(z_e, \rho, \phi) = \varphi_n(z_e) f_{m,l}(\rho, \phi). \quad (4)$$

Для того чтобы найти их, нужно решить уравнение движения электрона в квантовой яме $V(z_e)$ в направлении z и уравнение относительного движения электрона и дырки в плоскости ямы.

Для электрона в КЯ:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V(z_e) - E_n \right] \varphi_n(z_e) = 0. \quad (5)$$

Находим энергию квантования E_n вдоль оси z и волновые функции $\varphi_n(z_e)$ электрона вдоль оси z . Пренебрегая хвостами волновой функции в барьерах, получим:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e L^2},$$

$$\varphi_n(z_e) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(n \frac{\pi}{L} z_e\right). \quad (6)$$

Здесь L — ширина КЯ.

Затем нужно решить уравнение для двумерного экситона:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \rho} - E_{m,l}^{\text{exc}} \right] f_{m,l}(\rho, \phi) = 0. \quad (7)$$

Здесь n — главное квантовое число, l — орбитальное квантовое число. Энергетический спектр 2D экситона:

$$E_{2D}^{\text{exc}} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{(n + |l| + 1/2)^2}.$$

Здесь m — главное квантовое число, l — орбитальное квантовое число $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm m$. Для основного состояния экситона ($m = 1, l = 0$) волновая функция 2D экситона имеет вид

$$f_{1,0}(\rho, \phi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2}{a_B} e^{-\frac{2\rho}{a_B}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\tilde{a}_B} e^{-\frac{\rho}{\tilde{a}_B}}. \quad (8)$$

Здесь $\tilde{a}_B = \frac{a_B}{2}$ — боровский радиус двумерного экситона, a_B — боровский радиус объемного экситона,

$$a_B = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu E_{3D}^{\text{exc}}}}. \quad (9)$$

Разлагая функцию $\Psi(z_e, z_h, \rho, \phi)$ в уравнении (3) по полной системе функций $\Phi_{n,m,l}(z_e, \rho, \phi)$ и подставляя в уравнение (3), получим

$$(E_n^e - E_{m,l}^{2D} - E)U_{n,m,l}(z_h) = \sum_{n',m',l'} \int dz_e d\rho d\phi \Phi_{n,m,l}^* \times \left(\frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - V_h(z_h) - \frac{e^2}{\epsilon\rho} + \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{\rho^2 + |z_e - z_h|^2}} \right) \times U_{n',m',l'}(z_h) \Phi_{n',m',l'} = 0. \quad (10)$$

В адиабатическом приближении, оставляя только первый член в этой сумме, получим

$$V_{\text{eff}}(z_h) = V(z_h) - Ry^{2D} + \frac{e^2}{\epsilon} \frac{2}{L} \frac{2}{\pi \tilde{a}_B^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz_e \left| \cos\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \right|^2 \times \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty \rho d\rho e^{-2\rho/\tilde{a}_B} \left[\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\sqrt{(\rho^2 + (z_e - z_h)^2)}} \right]. \quad (11)$$

Получаем, что эффективный потенциал, действующий на дырку со стороны электрона и стенок квантовой ямы, имеет вид

$$V_{\text{eff}}(z_h) = V(z_h) + Ry^{2D} - \frac{e^2}{\epsilon \tilde{a}_B} \frac{1}{L} \frac{8}{\tilde{a}_B} \int_{-L/2}^{L/2} dz_e \left| \cos\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \right|^2 \times \int_0^\infty \rho d\rho e^{-2\rho/\tilde{a}_B} \left[\frac{1}{\sqrt{(\rho^2 + (z_e - z_h)^2)}} \right]. \quad (12)$$

Для симметричной ямы уровни энергии дырок и их волновые функции в этом потенциале находились вариационным методом с пробными волновыми функциями гармонического осциллятора:

$$U_k(z_h) = \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} \left(\frac{2}{\pi L h} \right)^{1/4} e^{-\left(\frac{z_h}{h}\right)^2} H_k \left(\sqrt{\frac{2z_h}{L h}} \right). \quad (13)$$

Для асимметричной ямы использовались пробные функции [13]:

$$U(z_h) = \left(\frac{3}{2} b^3 \right)^{1/2} z_h e^{-\frac{1}{2}(bz_h)^{3/2}}. \quad (14)$$

Результаты расчета представлены в табл. 2 и 3. С этими волновыми функциями были вычислены также силы осцилляторов оптических переходов. Силы осциллятора или радиационное затухание экситона Γ_0 в КЯ определяются интегралом перекрытия волновых функций электрона и дырки:

$$\Gamma_0 = \frac{\pi k_0 a_B^3}{2} \omega_{LT} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(z) U_k(z) dz \right]^2. \quad (15)$$

Здесь $\omega_{LT} \approx 0.66$ мэВ — величина продольно-поперечного расщепления объемного экситона в CdTe [14,15],

$a_B = 60$ А — боровский радиус объемного экситона в CdTe, $k_0 = \frac{\omega}{c}$ — волновой вектор света.

На рис. 3, *a* и *c* приведен результат расчета потенциала и уровней энергии для легких и тяжелых дырок в симметричной структуре, а на рис. 3, *b* и *d* — в асимметричной структуре с квантовой ямой. В расчете использовались параметры: $\tilde{a}_B \approx 30$ А, $Ry^{2D} \approx 40$ мэВ.

Энергия электрона на нижнем уровне размерного квантования в симметричной квантовой яме, отсчитанная от дна ямы CdTe, $E_e = 20$ мэВ. Энергия электрона в асимметричной квантовой яме немного выше и равна $E_e = 23$ мэВ.

4. Обсуждение результатов

Форма контура экситонного отражения позволяет определить расстояние от поверхности до квантовой ямы [3]. Действительно, коэффициент отражения от структуры, содержащей квантовую яму:

$$r = r_{01} + \frac{t_{01} t_{10} e^{2i\varphi}}{1 - r_{10} r_{0W} e^{2i\varphi}} r_{0W}. \quad (16)$$

Здесь коэффициенты пропускания границей вакуум—кристалл со стороны кристалла — t_{10} и со стороны вакуума — t_{01} ; r_{01} и r_{10} — коэффициенты отражения на границе вакуум—кристалл со стороны вакуума и кристалла, r_{0W} — коэффициент отражения от квантовой ямы, $\varphi = k(d + \frac{L}{2})$ — набег фазы при прохождении света от поверхности до ямы, d — расстояние от поверхности до ямы, k — волновой вектор света.

Пренебрегая многократными отражениями и квадратичным по r_{0W} вкладом, получим для наблюдаемого коэффициента отражения:

$$R = |r|^2 \approx R_0 \left[1 + 2 \frac{t_{01} t_{10}}{r_{01}} \text{Re}\{r_{0W} e^{2i\varphi}\} \right]. \quad (17)$$

Таким образом, форма спектра отражения определяется сдвигом фаз φ световых волн, отраженных от поверхности и отраженных от квантовой ямы. Толщина наружного барьера в наших структурах составляет 90 нм, показатель преломления света в CdZnTe в этой спектральной области равен $n = 3.3$. Отсюда получаем, что набег фазы световой волны при прохождении барьерного слоя примерно равен π . Таким образом, форма контура экситонного отражения от ямы должна быть обратной форме контура отражения от поверхности, что и видно в спектрах (рис. 2, *c*). Таким образом особенности спектров отражения на энергиях 1.597, 1.602, 1.609 и 1.620 эВ должны относиться к экситонным переходам в квантовой яме.

Единственным отличием асимметричной структуры от симметричной является то, что в барьерном слое CdMgTe показатель преломления на энергии экситонных резонансов в квантовой яме равен $n = 2.45$. В этом

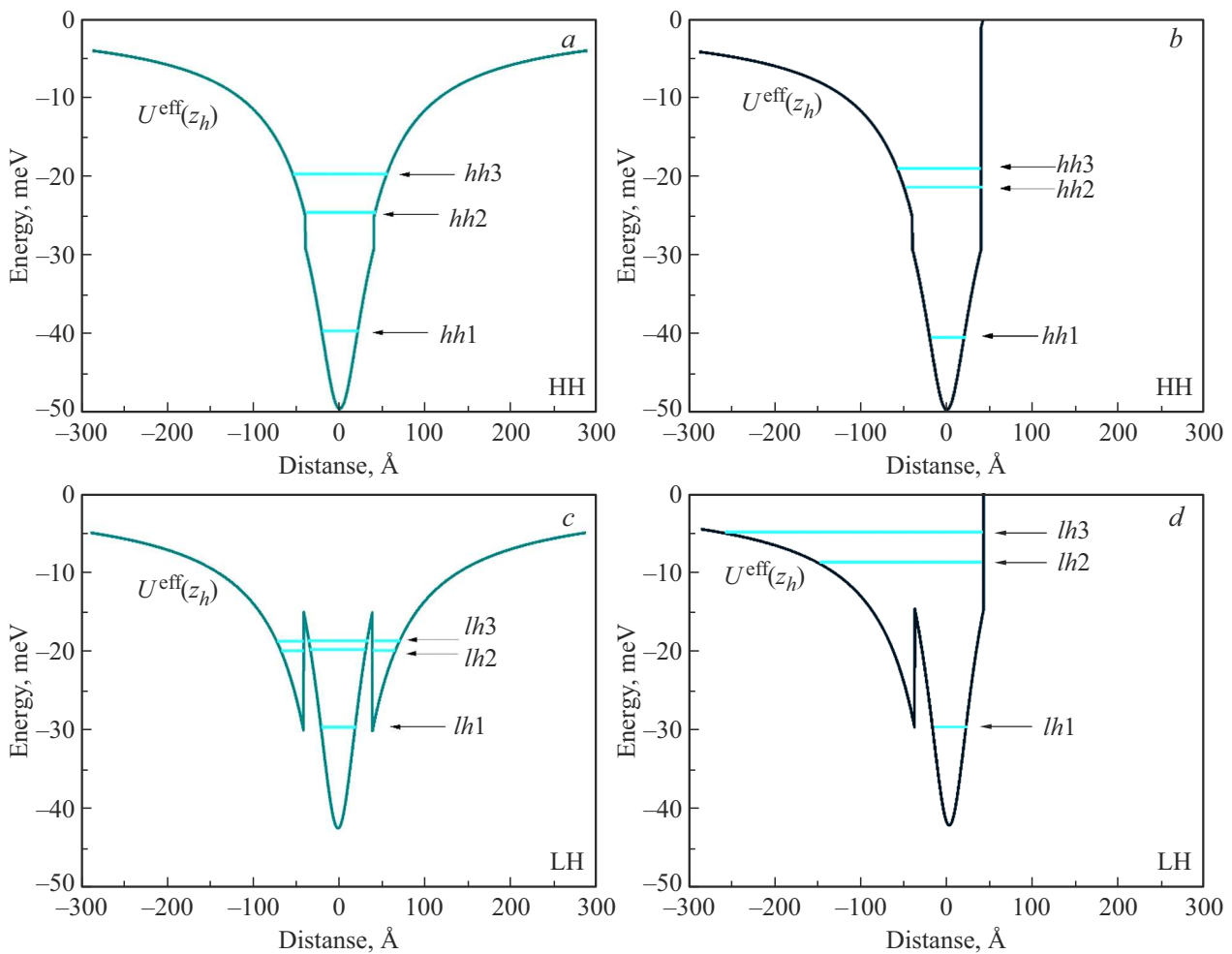


Рис. 3. Расчет эффективного потенциала, создаваемого электроном, и энергетических уровней дырок в квантовой яме. $U^{\text{eff}}(z_h) = U(z_h) + U^{\text{(coulomb)}}(z_h)$ — эффективный потенциал, действующий на дырку, отсчитанный от потолка валентной зоны барьера CdZnTe. (a, b) — тяжелые дырки в симметричной и асимметричной ямах, (c и d) — легкие дырки в симметричной и асимметричной ямах соответственно.

случае набег фазы световой волны при прохождении барьерного слоя примерно равен $\pi/2$. Это позволяет идентифицировать спектральные особенности на энергиях 1.601, 1.604, 1.612 и 1.620 эВ как относящиеся к квантовой яме. Эти значения немного выше энергий экситонных переходов в симметричной квантовой яме. Действительно, для ямы с асимметричными барьерами уровень энергии должен лежать немного выше, чем для ямы с симметричными барьерами. В асимметричной структуре форма контура экситонного отражения от барьера CdZnTe такая же, как и от ямы. Так как этот барьер находится на том же расстоянии от поверхности, набег фазы световой волны, отраженной от ямы и от слоя CdZnTe, при прохождении слоя от ямы до поверхности практически одинаковый.

Используя формулы (16), (17), были рассчитаны спектры экситонного отражения от симметричной и асимметричной структуры с квантовой ямой (рис. 4, a и b) для сравнения со спектрами, полученными в эксперименте (рис. 2, a и c).

Радиационное и нерadiационное затухание экситона можно оценить из экспериментальных спектров. Амплитудный коэффициент экситонного отражения от одиночной квантовой ямы [16]:

$$r_{QW} = \frac{i\Gamma_0}{\omega_0 - \omega - i(\Gamma_0 + \Gamma)}. \quad (18)$$

Здесь Γ_0 — радиационное затухание экситона, Γ — нерadiационное затухание, ω_0 — частота экситонного резонанса.

Таким образом, ширина контура экситонного отражения равна 2Γ , а амплитуда контура отражения равна Γ_0/Γ . Сопоставление результатов, полученных путем численного расчета, спектров отражения и спектров ФЛ приведено в табл. 2 и 3. Прежде всего возникает вопрос — почему некоторые экситонные состояния проявляются в спектрах отражения в виде ярких линий, но полностью отсутствуют в спектрах ФЛ. Обычно бывает наоборот: благодаря энергетической релаксации, носители накапливаются в нижних по энергии состояниях, из

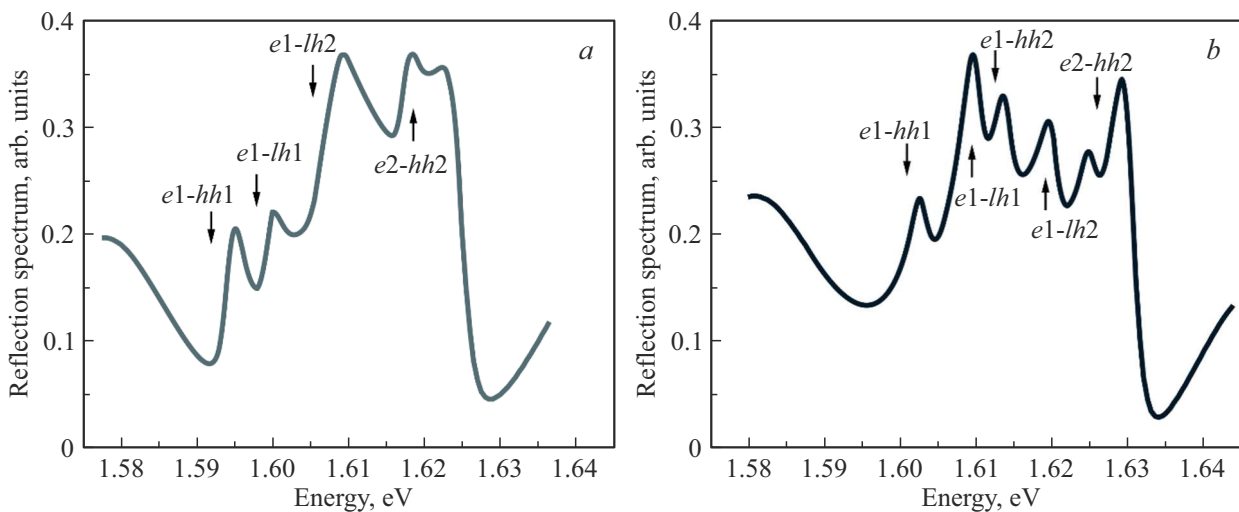


Рис. 4. Спектры экситонного отражения от симметричной (а) и асимметричной (б) структуры с квантовой ямой, рассчитанные с использованием формул (12)–(15).

Таблица 2. Симметричная яма

Эксперимент, эВ	Расчет, эВ	Переход	Эксперимент Γ_0 , мэВ	Расчет Γ_0 , отн.ед.	Эксперимент Γ , мэВ
1.597	1.598	$e1-hh1$	0.9	0.5	1.5
1.602	1.605	$e1-lh1$	0.6	0.2	1.5
1.609	1.612	$e1-lh2$	0.23	0.1	1.4
	1.613	$e1-lh3$	0.23	0.1	1.4
	1.613	$e1-hh3$	0.23	0.1	1.4
1.6185	1.620	$e2-hh2$	0.048	0.2	1.9
1.6265	1.6265	Барьер	$\omega_{LT} = 0.65$	–	2.3

Таблица 3. Асимметричная яма

Эксперимент, эВ	Расчет, эВ	Переход	Эксперимент Γ_0 , мэВ	Расчет Γ_0 , отн.ед.	Эксперимент Γ , мэВ
1.600	–	Трион	–	–	–
1.604	1.603	$e1-hh1$	0.8	1.0	1.3
1.611	1.612	$e1-lh1$	0.4	0.4	1.5
1.614	1.619	$e1-hh2$	0.2	0.4	1.0
1.621	1.625	$e1-lh2$	0.2	0.4	1.3
1.625	1.627	$e2-hh2$	0.2	0.3	1.4
1.631	1.630	Барьер	–	–	–

которых и происходит ФЛ. В результате интенсивность ФЛ может быть значительной даже при малой силе осциллятора оптического перехода.

При нерезонансном фотовозбуждении дырки быстро теряют энергию, релаксируя на дно соответствующих зон. В нашей структуре для тяжелых дырок (hh) это квантовая яма (КЯ) глубиной 4.2 мэВ, а для легких дырок (lh) это слои CdTe высотой 15.3 мэВ (рис. 3). Из этих слоев легкие дырки быстро переходят в слои CdZnTe, где их энергия меньше.

Электроны приходят на дно своей зоны гораздо позже дырок. Это подтверждается их большей подвижностью

по сравнению с дырками и, следовательно, меньшей скоростью потери энергии. Оказавшись на нижнем уровне размерного квантования в КЯ, они начинают связываться с дырками, образуя экситоны. Сначала образуются высоковозбужденные связанные состояния с большим радиусом. Электроны и дырки, испуская сперва акустические фононы, а затем и оптические, „спускаются“ по энергии к основному состоянию экситона [17].

Те легкие дырки, которые на момент прихода электронов в КЯ, оказались в слоях CdZnTe, образуют экситоны ($e1-lh2$). Но в слоях CdTe на момент прихода

электронов дырок не оказывается и такие экситоны ($e1-lh1$) не образуются.

Таким образом, дырки, которые до прихода электронов попали в слои CdTe, не могут формировать экситоны и такие экситоны не наблюдаются в спектрах ФЛ. Однако в спектрах отражения эти экситоны ($e1-lh1$) ярко проявляются, так как для их формирования не нужен промежуточный процесс связывания и релаксации по энергии.

В асимметричных структурах такой переход виден и в спектре отражения, и в спектре фотолюминесценции. Это связано с тем, что высокий барьер CdMgTe эффективно отталкивает дырки и не дает им уходить от квантовой ямы.

Расчет показывает, что из-за того что потенциал для дырок сильно „расширяется“ с ростом энергии, уровни квантования дырок сближаются. Так, расстояние между уровнями дырок в симметричной КЯ: $hh2$, $hh3$; $lh2$ и $lh3$ не превышает 2 мэВ. Таким образом, все эти уровни практически перекрываются и проявляются в спектрах на одной и той же энергии в виде одной линии (линия $e1-lh2$ на рис. 2, с).

Действительно, в спектрах ФЛ и отражения симметричной структуры на рис. 2, а и с видно, что переход $e1-lh2$, который должен быть запрещен по симметрии, проявляется в виде яркой линии. Это объясняется тем, что уровни легких и тяжелых дырок $hh2$, $hh3$; $lh2$ и $lh3$ расположены очень близко друг к другу по энергии. В результате даже небольшое возмущение, например из-за слабой асимметрии структуры, приводит к их смешиванию, и этот переход проявляется в спектрах.

5. Заключение

В работе исследованы спектры поляризованного отражения от напряженных структур с квантовыми ямами с симметричными $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te/CdTe/Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ и асимметричными $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te/CdTe/Cd_{0.4}Mg_{0.6}Te$ барьерами. Особенностью данных структур является то, что разрыв зон в валентной зоне очень мал. В результате из-за деформаций, вызванных рассогласованием постоянных решетки материалов ям и барьеров, зонная диаграмма для тяжелых дырок имела тип I, а для легких — тип II. При этом энергия связи экситона в несколько раз превосходила величину разрыва зон в валентной зоне. Это приводило к тому, что на дырку действовал довольно „необычный“ потенциал со стороны электрона и потенциала квантовой ямы. Проведен расчет этого потенциала, уровней квантования носителей в структуре и радиационного затухания основного и возбужденных состояний экситона. Расчет показал хорошее согласие с величинами, полученными из анализа спектров отражения без использования подгоночных параметров.

В структурах с симметричными барьерами в спектрах отражения обнаружены экситонные резонансы, не проявляющиеся в спектрах фотолюминесценции. Эта особенность объяснена невозможностью заселения некоторых состояний при нерезонансном оптическом возбуждении.

Благодарности

Авторы благодарят Л.Е. Голуба и Е.Л. Ивченко за полезные обсуждения.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 21-12-00304.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Comprehensive Guide on Organic and Inorganic Solar Cells. Fundamental Concepts to Fabrication Methods.* A volume in Solar Cell Engineering, ed. by Md. Akhtaruzzaman and Vidhya Selvanathan (Academic Press, 2022).
- [2] D.J. Dunstan, A.D. Prins, B. Gil, J.P. Faurie. Phys. Rev. B, **44**(8), 4017 (1991).
- [3] Е.Л. Ивченко, П.С. Копьев, В.П. Кочерешко, И.Н. Уралцев, Д.Р. Яковлев, С.В. Иванов, Б.Я. Мельцер, М.А. Калигиевский. ФТП, **22**(5), 784 (1988).
- [4] H. Mathieu, J. Allegre, A. Chatt, P. Lefebvre, J.P. Faurie. Phys. Rev. B, **38**(11), 7740 (1988).
- [5] H. Tuffigo, N. Magnea, H. Mariette, A. Wasiela, Y. Merle d'Aubigne. Phys. Rev. B, **43**(18), 14629 (1991).
- [6] Landolt-Bornstein. *Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology*, ed. by W. Martienssen. Group III: Condens. Matter (Springer, 2000).
- [7] E. Deleporte, J.M. Berroir, G. Bastard, C. Delalande, J.M. Hong, L.L. Chang. Phys. Rev. B, **42**(9), R5891 (1990).
- [8] E. Deleporte J.M. Berroir, C. Delalande, N. Magnea, H. Mariette, J. Allegre, J. Calatayud. Phys. Rev. B, **45**(11), R6305 (1992).
- [9] N.G. Filosofov, A.Y. Scrov; G. Karczewski, V.F. Agekian, H. Mariette, V.P. Kochereshko. AIP Advances, **10**(8), 085224 (2020).
- [10] H. Mariette, F. Dal'bo, N. Magnea, G. Lentz, H. Tuffigo. Phys. Rev. B, **38**(17), 12443 (1988).
- [11] P. Peyla, Y. Merle d'Aubigne, A. Wasiella, R. Romestain, H. Mariette, M.D. Sturge, N. Magnea, H. Tuffigo. Phys. Rev. B, **46**(3), 1557 (1992).
- [12] Ал.Л. Эфрос. ФТП, **20**(7), 1281 (1986).
- [13] Y. Takada, Y. Uemura. J. Phys. Soc. Jpn., **43**, 139 (1977).
- [14] E.L. Ivchenko, A.V. Kavokin, V.P. Kochereshko, G.R. Pozina, I.N. Uraltsev, D.R. Yakovlev, R.N. Bicknell-Tassius, A. Waag, G. Landwehr. PRB, **46**, 7713 (1992).
- [15] H. Tuffigo, R.T. Cox, N. Magnea, Y. Merle d'Aubigne, A. Million. PRB, **37**, 4310 (1988).
- [16] E.L. Ivchenko. *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures* (Alpha Science Int., Harrow, UK, 2005).
- [17] В.Н. Абакумов, Л.Н. Крещук, И.Н. Ясиевич. ФТП, **12**, 152 (1977).

Редактор Г.А. Оганесян

Light and heavy excitons in strained CdTe/CdZnTe quantum wells

L.V. Kotova^{1,2}, D.D. Belova¹, R. Andre³,
H. Mariette^{3,4}, V.P. Kochereshko¹

¹ Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

² ITMO University,
197101 St. Petersburg, Russia

³ Institut Neel CNRS,
F-38000 Grenoble, France

⁴ Japanese-French laboratory for Semiconductor
Physics and Technology J-F AST,
CNRS, Universite Grenoble Alpes,
University of Tsukuba, Japan

Abstract The spectra of photoluminescence and polarized reflection under normal and oblique incidence of light from structures with quantum wells with symmetric $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}/\text{CdTe}/\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ and asymmetric $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}/\text{CdTe}/\text{Cd}_{0.4}\text{Mg}_{0.6}\text{Te}$ barriers have been studied. Due to the mechanical stresses caused by the mismatch of the crystal lattices of the wells and barriers, the energy of light holes in quantum wells was higher than in barriers, i. e., the zone structure for them was of type II. However, in the reflection spectra, the lines of heavy and light excitons had comparable intensities. In structures with symmetric barriers, exciton resonances, which do not appear in the photoluminescence spectra, were found in the reflection spectra. A detailed calculation of the energy levels and reflection spectra has been carried out.