

## 08 Резонансная оже-рекомбинация в квантовых ямах HgTe/CdHgTe для лазеров среднего инфракрасного диапазона

© М.С. Жолудев<sup>1,2</sup>, К.Е. Кудрявцев<sup>1</sup>, С.В. Морозов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: zholudev@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 28 апреля 2025 г.

В окончательной редакции 4 июня 2025 г.

Принято к публикации 4 июня 2025 г.

Проведены детальные расчеты структуры локализованных и делокализованных (надбарьерных) состояний дырок в квантовых ямах Hg(Cd)Te/CdHgTe, излучающих в средней инфракрасной области спектра. Установлен наиболее вероятный механизм и предложены пути подавления резонансной оже-рекомбинации  $ehh$ -типа, экспериментально наблюдавшейся ранее в подобных гетероструктурах.

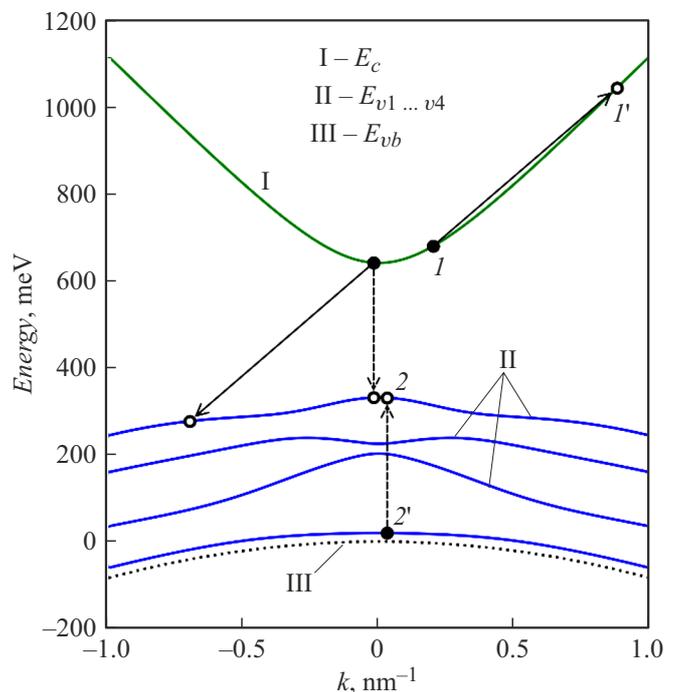
**Ключевые слова:** оже-рекомбинация, кадмий–ртуть–теллур, квантовая яма, средний инфракрасный диапазон, полупроводниковый лазер.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.16.60932.20361

Развитие межзонных полупроводниковых лазеров среднего инфракрасного диапазона, формируемых на основе узкозонных гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) и излучающих на длинах волн  $3\text{--}8\ \mu\text{m}$ , важно для решения практических задач в области спектроскопии газов, мониторинга окружающей среды и обеспечения безопасности [1], и хорошо известно, что пороги генерации в таких длинноволновых лазерах практически всегда определяются безызлучательной оже-рекомбинацией [2]. При этом могут иметь место различные реализации оже-процессов, некоторые из которых схематично изображены на рис. 1. В первую очередь это „классические“ процессы  $eeh$ -типа, в которых энергию межзонной рекомбинации уносит электрон, переходящий в более высокоэнергетические состояния в той же подзоне размерного квантования ( $I'$  на рис. 1). Подобные процессы имеют некоторый энергетический порог и, таким образом, могут быть частично подавлены при не слишком высоких температурах. Однако возможны и конкурирующие оже-процессы, в которых третья („разогреваемая“) частица переходит в другую подзону размерного квантования либо в состояния континуума барьерных слоев ( $ehh$  на рис. 1). В зависимости от энергетических зазоров между различными подзонами в КЯ и величин разрывов зон на гетерограницах такие процессы могут оказываться беспороговыми (резонансными) и играть определяющую роль в межзонной динамике неравновесных носителей [3].

Ранее в работе [4] авторы исследовали температурную зависимость интегральной интенсивности спонтанной эмиссии КЯ Hg(Cd)Te/CdHgTe, излучающих на длинах волн  $3.5\text{--}4.5\ \mu\text{m}$ , и при проходе по температуре в диапазоне  $T = 10\text{--}300\ \text{K}$  косвенно наблюдали резонансный пик в темпе безызлучательной рекомбинации. Предварительные расчеты зонной структуры исследуемых КЯ

показали, что качественно этот резонанс соответствует совпадению ширины запрещенной зоны в КЯ (энергии излучательных переходов) и энергии ионизации основ-



**Рис. 1.** Расположение энергетических зон для КЯ  $\text{Hg}_{0.89}\text{Cd}_{0.11}\text{Te}/\text{Cd}_{0.85}\text{Hg}_{0.15}\text{Te}$  шириной  $d_{\text{QW}} = 3.5\ \text{nm}$ . Показаны основная электронная подзона ( $E_c$ ) и ряд дырочных подзон ( $E_{v1\dots v4}$ ). Энергия отсчитывается от потолка валентной зоны барьеров  $E_{vb}$ . Переходы для классической (пороговой) оже-рекомбинации  $eeh$ -типа изображены сплошными стрелками, а для резонансной (беспороговой)  $ehh$ -рекомбинации — штриховыми. Расчеты энергии зон выполнены по методике, изложенной в настоящей работе.

ного дырочного состояния в КЯ, что позволило связать видимые в эксперименте особенности люминесцентного отклика с проявлением оже-процессов *ehh*-типа. В то же время осталось неясным, какие именно дырочные состояния (2' на рис. 1) обеспечивают возможность подобных резонансных процессов: это могут быть как высоколежащие локализованные состояния в КЯ, так и надбарьерные состояния, резонансные либо свободные. В настоящей работе проводится детальный расчет энергий и структуры дырочных состояний в КЯ Hg(Cd)Te/CdHgTe с параметрами [4]. Заметим, что микроскопические расчеты вероятностей различных оже-процессов, необходимые для количественного рассмотрения межзонной динамики, остаются за рамками настоящей работы. В то же время качественно полученные данные позволяют понять конкретные реализации резонансных оже-процессов и наметить пути оптимизации дизайнов КЯ для их подавления, а значит, и достижения возможно более высокотемпературной лазерной генерации.

Для вычисления энергий и волновых функций электронных состояний в КЯ используется метод огибающих функций в приближении Берга–Формана [5,6] с гамильтонианом Кейна  $8 \times 8$  [7]. Волновые функции частиц представляются в виде разложения по набору периодических базисных функций  $u_n(\mathbf{r})$  с коэффициентами огибающими  $F_n(\mathbf{r})$ , плавно зависящими от координат:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n F_n(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r}).$$

При этом стационарное уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$\hat{\mathbf{H}}\mathbf{F}(\mathbf{r}) = E\mathbf{F}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где гамильтониан  $\hat{\mathbf{H}}$  является матрицей операторов, действующих на огибающие. Для обсчета структур (детальное описание которых приводится в [4]), выращиваемых на подложках (013) GaAs, используется скорректированный гамильтониан [8], полученный путем поворота системы координат в соответствии с [9]. Расчетная модель учитывает встроенную деформацию, предполагающая структуру полностью напряженной и наследующей постоянную решетку буферного слоя CdTe (с размером элементарной ячейки 6.48 Å). В силу трансляционной инвариантности в плоскости КЯ проекция квазиимпульса  $\mathbf{k}_{\parallel}$  на эту плоскость сохраняется, что позволяет разделить переменные и привести вид огибающих функций  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  и уравнения (1) к следующему:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}}\mathbf{f}(z), \\ \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{k}_{\parallel})\mathbf{f}(z) &= E\mathbf{f}(z), \end{aligned} \quad (2)$$

где ось  $z$  — направление роста КЯ. Далее для вычисления локализованных состояний в КЯ мы рассмотрим виртуальную сверхрешетку, состоящую из таких КЯ, разделенных достаточно широкими (исключающими туннелирование между соседними ямами) барьерами.

Неизвестная часть огибающих функций  $\mathbf{f}(z)$  раскладывается в ряд Фурье, а уравнение (2) сводится к задаче на собственные значения матрицы гамильтониана

$$\mathbf{f}(z) = \sum_k \mathbf{c}_k e^{ikz},$$

$$\sum_{k'} \langle e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}+ikz} | \hat{\mathbf{H}} | e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}+ik'z} \rangle \mathbf{c}_{k'} = E\mathbf{c}_k.$$

При расчетах использовались следующие выражения для зависимостей ширины запрещенной зоны  $E_g$  и смещения  $E_v$  валентной зоны тройного раствора  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  (относительно чистого HgTe) от состава и температуры [10,11]:

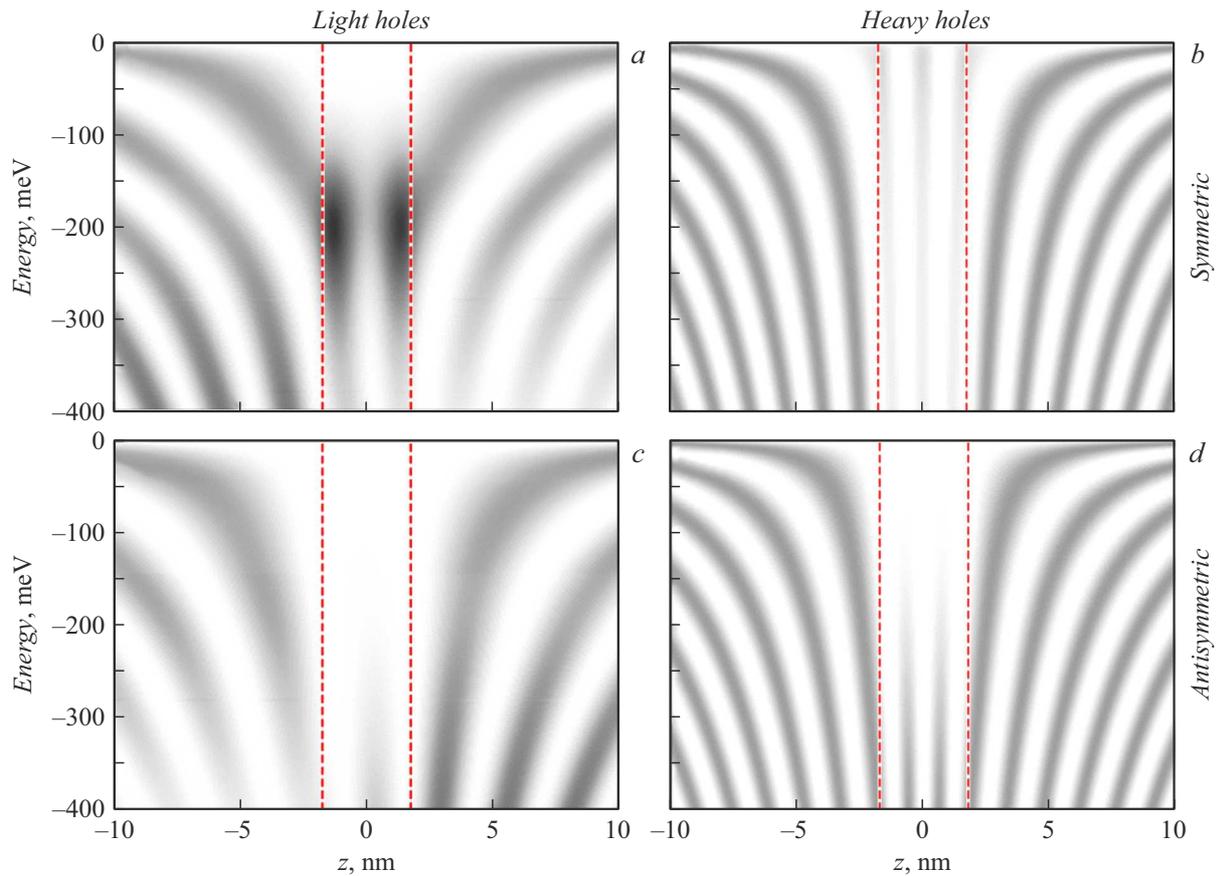
$$\begin{aligned} E_g(x, T)[\text{meV}] &= -303(1-x) + 1606x - 132x(1-x) \\ &+ \frac{(0.63(1-x) - 0.325x - 0.592x(1-x))T^2}{11(1-x) + 78.7x + T}, \end{aligned}$$

$$E_v(x, T)[\text{meV}] = (0.4T - 570)x.$$

Значения остальных параметров гамильтониана были взяты из работы [7], а модулей упругости — из работы [8]. Мы считаем, что эти значения линейно интерполируются между HgTe и CdTe и не меняются с температурой.

Для расчета делокализованных состояний в области энергий ниже потолка валентной зоны барьеров мы используем метод матрицы рассеяния [12,13]. Для этого гетероструктура разбивалась по оси  $z$  на отрезки, на каждом из которых вычислялись все линейно независимые частные решения уравнения (2). Общая волновая функция получалась путем сшивки линейных комбинаций этих решений на границах отрезков исходя из непрерывности огибающих и потока вероятности. В валентной зоне мы получаем четыре линейно независимых решения, соответствующих различным типам дырок (легким либо тяжелым) и направлениям их движения (вдоль и против оси  $z$ ); каждое из решений также двукратно вырождено по спину. Корректная сортировка частных решений с разделением на волны, распространяющиеся в направлениях  $z+$  и  $z-$ , обеспечивает устойчивость данного метода.

Применяя два описанных выше подхода, мы можем вычислить энергии и волновые функции любых состояний носителей в гетероструктуре с КЯ — как локализованных, так и делокализованных. Рассмотрим сначала надбарьерные состояния дырок. Результаты расчетов плотности вероятности в зависимости от ростовой координаты  $z$  для различных значений энергии частиц приведены на рис. 2. Поскольку мы рассматриваем симметричную КЯ, наибольший интерес представляют симметричные и антисимметричные состояния, когда две дырки движутся навстречу друг другу в фазе или противофазе, соответственно именно эти решения могут дать резонансные состояния вблизи ямы. Видно, что для состояний вблизи потолка валентной зоны барьеров

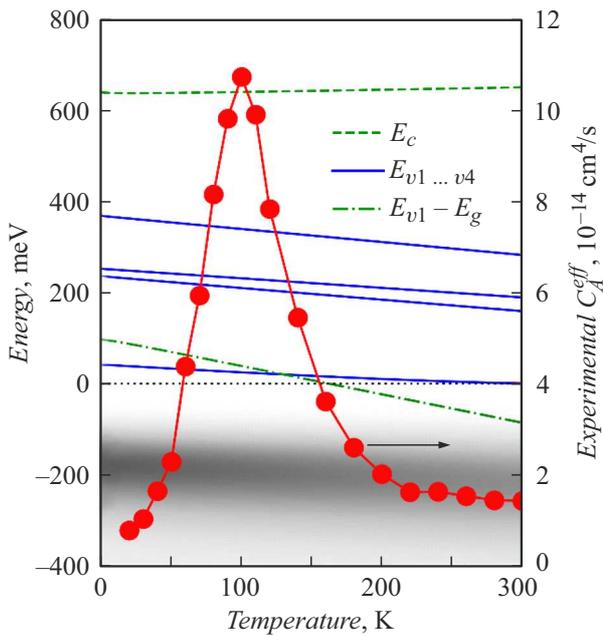


**Рис. 2.** Распределение плотности вероятности для надбарьерных состояний дырок в континууме валентной зоны гетероструктур с КЯ  $\text{Hg}_{0.89}\text{Cd}_{0.11}\text{Te}/\text{Cd}_{0.85}\text{Hg}_{0.15}\text{Te}$  (толщина КЯ  $d_{\text{QW}} = 3.5$  nm). Приведены профили для четных (*symmetric*) (a и b) и нечетных (*antisymmetric*) (c и d) состояний легких (a, c) и тяжелых (b, d) дырок. Расчет выполнен для температуры  $T = 125$  K. Энергия отсчитывается от потолка валентной зоны барьеров, вертикальные штриховые линии соответствуют границам КЯ (центрированной при  $z = 0$ ).

вероятность локализации дырок внутри КЯ ниже, чем вне нее (имеет место эффект надбарьерного отражения). По этой причине сложно ожидать, что волновые функции надбарьерных состояний будут иметь существенный интеграл перекрытия с локализованными состояниями в КЯ, а значит, наблюдаемое в эксперименте резонансное поведение коэффициента оже-рекомбинации вряд ли можно объяснить выбросом дырок напрямую в континуум барьерных слоев. Отметим также, что резонансные надбарьерные состояния (в значительной мере локализованные в КЯ) в рассматриваемой области энергий существуют, согласно расчетам, лишь для легких дырок, но и они удалены от потолка валентной зоны на величину около 200 meV, а значит, также могут быть исключены из рассмотрения.

Перейдем к локализованным состояниям в КЯ. На рис. 3 приведены расчетные энергии локализованных состояний электронов ( $E_c$ ) и дырок ( $E_{v1}, E_{v2}, E_{v3}, E_{v4}$ ) в КЯ в зависимости от температуры и для сравнения температурная зависимость плотности вероятности нахождения дырки в надбарьерной области КЯ, позволяющая определить энергию резонансного состояния. Счи-

тая, что в межзонной рекомбинации (как излучательной, так и безызлучательной) участвуют электроны и дырки, расположенные у краев соответствующих зон (энергия рекомбинации приблизительно равна  $E_g \equiv E_{c1} - E_{v1}$ ), можно оценить энергию ( $E_{v1} - E_g$ ) конечного состояния второй дырки при *ehh* оже-рекомбинации; эта величина показана штрихпунктиром на рис. 3. Видно, что расстояние между основной ( $E_{v1}$ ) и возбужденной ( $E_{v4}$ ) подзонами размерного квантования приблизительно совпадает с  $E_g$  при  $T \sim 120-130$  K, т.е. при температурах, близких к максимуму экспериментально измеряемой зависимости оже-коэффициента  $C_A^{eff}(T)$  на рис. 3. По этой причине резонанс в  $C_A(T)$  логично связать с „подключением“ *ehh* оже-процессов, в которых вторая дырка переходит из основного состояния в КЯ в верхнее возбужденное состояние с энергией, близкой к энергии потолка валентной зоны барьерных слоев. На самом деле энергия рекомбинации электрона и дырки превышает ширину запрещенной зоны в силу конечной, ненулевой тепловой энергии частиц, и этим можно объяснить включение резонансной оже-рекомбинации



**Рис. 3.** Энергии электронных и дырочных состояний в исследуемых КЯ, рассчитанные в зависимости от температуры (линии), и экспериментально полученная в [4] температурная зависимость эффективного коэффициента оже-рекомбинации  $C_A^{eff}$  (символы). В нижней части графиками серого показан интеграл плотности вероятности по КЯ для дырок в надбарьерной области энергий.

в эксперименте при температурах несколько меньше ожидаемых исходя из расчетных данных.

Полученные результаты позволяют сформулировать подход к подавлению такого типа резонансных оже-процессов: это, по-видимому, возможно путем „вытеснения“ „резонансной“ возбужденной подзоны в область непрерывного спектра при уменьшении ширины КЯ (с сохранением энергии излучательных переходов за счет снижения доли кадмия  $x_{Cd}^{QW}$  в КЯ). Так, при переходе от КЯ шириной  $d_{QW} = 3.5 \text{ nm}$  с  $x_{Cd}^{QW} \sim 8\text{--}10\%$  к КЯ шириной  $d_{QW} = 3 \text{ nm}$  с  $x_{Cd}^{QW} \sim 5\text{--}7\%$  уровень  $E_{v4}$  перестает быть локализованным, однако это не приводит к появлению вблизи барьера резонансного состояния тяжелых дырок, и распределение плотности вероятности качественно остается сходным с приведенным на рис. 2. Подобная отстройка энергий межподзонных дырочных переходов (между основной и возбужденными подзонами размерного квантования) от энергии межзонной рекомбинации может в заметной мере улучшить рабочие характеристики HgCdTe-лазеров среднего инфракрасного диапазона.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научно-го фонда (грант № 22-72-10111).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Z. Du, S. Zhang, J. Li, N. Gao, K. Tong, Appl. Sci., **9**, 338 (2019). DOI: 10.3390/app9020338
- [2] J.R. Meyer, C.L. Canedy, M. Kim, C.S. Kim, C.D. Merritt, W.W. Bewley, I. Vurgaftman, IEEE J. Quantum Electron., **57** (5), 2500110 (2021). DOI: 10.1109/JQE.2021.3096219
- [3] T.D. Eales, I.P. Marko, B.A. Ikyo, A.R. Adams, S. Arafin, S. Sprengel, M.-C. Amann, S.J. Sweeney, IEEE J. Select. Top. Quantum Electron., **23** (6), 1500909 (2017). DOI: 10.1109/JSTQE.2017.2687823
- [4] K.E. Kudryavtsev, A.A. Yantser, M.A. Fadeev, V.V. Rumyantsev, A.A. Dubinov, V.Ya. Aleshkin, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretzky, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov, Appl. Phys. Lett., **123**, 182102 (2023). DOI: 10.1063/5.0177912
- [5] M.G. Burt, J. Phys.: Condens. Matter, **4**, 6651 (1992). DOI: 10.1088/0953-8984/4/32/003
- [6] B.A. Foreman, Phys. Rev. B, **48**, 4964 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevB.48.4964
- [7] E.G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C.R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, Phys. Rev. B, **72**, 035321 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevB.72.035321
- [8] M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wróbel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretzky, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, W. Knap, Phys. Rev. B, **86**, 205420 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.86.205420
- [9] J. Los, A. Fasolino, A. Catellani, Phys. Rev. B, **53**, 4630 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevB.53.4630
- [10] J.P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, B. Toulouse, R. Legros, A. Lusson, J. Appl. Phys., **67**, 6454 (1990). DOI: 10.1063/1.345119
- [11] C.R. Becker, V. Latussek, A. Pfeuffer-Jeschke, G. Landwehr, L.W. Molenkamp, Phys. Rev. B, **62**, 10353 (2000). DOI: 10.1103/PhysRevB.62.10353
- [12] D.Y.K. Ko, J.C. Inkson, Phys. Rev. B, **38**, 9945 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevB.38.9945
- [13] M.S. Zholudev, O.M. Litovchenko, S.V. Morozov, Semicond. Sci. Technol., **40**, 035001 (2025). DOI: 10.1088/1361-6641/ada9cc