

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА СЛОЕВ НА ЗОННЫЙ СПЕКТР СВЕРХРЕШЕТОК ТИПА $Cd_xHg_{1-x}Te-Cd_yHg_{1-y}Te$

Л. Г. Герчиков, А. В. Субашиев, Салман Далла

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 12.05.1992. Принята к печати 15.06.1992)

Рассмотрена эволюция энергетического спектра сверхрешетки $Cd_xHg_{1-x}Te-Cd_yHg_{1-y}Te$ при изменении состава слоев. Подробно исследован переход от сверхрешетки III типа к сверхрешетке I типа, происходящий при $y=0.16$. Показано, что в этом случае зависимость ширины запрещенной зоны сверхрешетки от толщины слоев становится более плавной, чем в сверхрешетке $CdTe-HgTe$, что расширяет возможности использования таких сверхрешеток для создания ИК фотоприемников.

1. Известно, что в сверхрешетках (СР) III типа (т. е. содержащих слой бесщелевого полупроводника, например, $Cd_xHg_{1-x}Te-HgTe$) при увеличении толщины слоев бесщелевого полупроводника $HgTe$ происходит быстрое уменьшение ширины запрещенной зоны E_g с последующей трансформацией спектра типа полупроводник—полуметалл—непрямой полупроводник [1-4]. В структурах $CdTe-HgTe$ с изолированными квантовыми ямами ширина запрещенной зоны обращается в нуль при толщинах слоев $HgTe$ $d_1 \leq 65 \text{ \AA}$, в СР с узкими и проницаемыми барьерами переход в полуметаллическую фазу происходит при $d_1 \approx 20 \text{ \AA}$, а область полуметаллической фазы оказывается очень широкой [5]. Такое поведение $E_g(d_1)$ существенно осложняет перспективы использования сверхрешеток типа $CdTe-HgTe$ в качестве фоточувствительного материала для далекой ИК области [6], так как при необходимости создания СР с заданной малой шириной E_g требования к параметрам структуры СР оказываются достаточно жесткими.

Дополнительные возможности для создания структур с требуемым зонным спектром дает использование СР типа $Cd_xHg_{1-x}Te-Cd_yHg_{1-y}Te$ [7] с оптимальным составом слоев, однако ввиду большого числа параметров, определяющих спектр таких СР, анализ поведения их спектра требует особого рассмотрения.

В настоящей работе выполнены численные расчеты зонной структуры СР $Cd_xHg_{1-x}Te-Cd_yHg_{1-y}Te$, а также качественный анализ изменения их спектров при изменении состава и толщин слоев. Рассмотрена эволюция спектра СР в окрестности $y=0.16$, когда бесщелевой материал $Cd_yHg_{1-y}Te$ становится узкощелевым, а структура превращается из СР III типа в СР I типа. Показано, что в этом случае зависимость E_g от толщины узких зонных слоев становится значительно более плавной, чем в СР $CdTe-HgTe$, что расширяет возможности использования таких СР для создания ИК фотоприемников.

2. Для анализа поведения спектра СР в зависимости от состава гетерослоев и их толщины будем использовать дисперсионное уравнение для спектра СР, полученное ранее [3] методом огибающих в модели Кейна, учитывающей состояния зоны проводимости Γ_6 и состояния легких и тяжелых частиц валентной зоны Γ_8 . В качестве параметров дисперсионное уравнение содержит толщины ям d_1 и барьеров d_2 , а также ряд параметров зонного спектра материалов слоев.

Последние в свою очередь зависят от состава слоев. В последующем рассмотрении мы не учитываем гофрировки зоны тяжелых дырок и, кроме того, считаем, что массы тяжелых дырок m_h и кейновские межзонные матричные элементы P не меняются при изменении состава раствора $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ и, таким образом, одинаковы в обоих слоях СР. Эти предположения часто используются при расчете зонной структуры СР $\text{CdTe}-\text{HgTe}$ и дают достаточно хорошие количественные результаты [1, 3, 4]. Зависимость энергетической щели $\varepsilon_g(x)$ между зонами Γ_6 и Γ_8 в растворе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ дается соотношением [7, 8]

$$\varepsilon_g(x) = -0.302 + 1.93x - 0.810x^2 + 0.832x^3 \text{ (эВ)}. \quad (1)$$

Активное обсуждение большого числа экспериментальных результатов привело к выводу [9, 10], что скачок валентной зоны на гетерогранице $\text{CdTe}-\text{HgTe}$ составляет $\Lambda = \varepsilon_{v1} - \varepsilon_{v2} = 350$ мэВ, где ε_{v1} , ε_{v2} — положения края зоны Γ_8 в слоях материала 1, соответствующих потенциальным ямам, и в слоях материала 2, соответствующих потенциальным барьерам для носителей. Для гетерограницы $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}-\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ мы будем использовать линейную интерполяцию

$$\Lambda(x, y) = 350(x - y) \text{ (мэВ)}. \quad (2)$$

Согласно [3], качественный вид минизонного спектра СР определяется порядком следования минизон при нулевом импульсе движения носителей вдоль слоев СР ($k=0$) и расталкиванием между минизонами при конечных значениях k . Порядок следования минизон, а также их ширина, соответствующая дисперсии спектра минизон по импульсу движения вдоль оси СР Q , устанавливаются из решения независимых дисперсионных уравнений типа Кронига—Пенни для легких и тяжелых носителей. При $Q=0$ и $Q=\pi/d$, где $d=d_1+d_2$, эти уравнения имеют вид

$$Q=0: \left(\frac{k_{v1}}{\varepsilon - \varepsilon_{v1}} \right)^{\pm 1} \text{ctg} \frac{k_{v1}d_1}{2} = - \left(\frac{k_{v2}}{\varepsilon - \varepsilon_{v2}} \right)^{\pm 1} \text{ctg} \frac{k_{v2}d_2}{2}, \quad (3)$$

$$Q=\pi/d: \left(\frac{k_{v1}}{\varepsilon - \varepsilon_{v1}} \right)^{\pm 1} \text{tg} \frac{k_{v1}d_1}{2} = \left(\frac{k_{v2}}{\varepsilon - \varepsilon_{v2}} \right)^{\pm 1} \text{ctg} \frac{k_{v2}d_2}{2}. \quad (4)$$

Здесь знак + соответствует четным, а — — нечетным минизонам (точнее плавным огибающим волновых функций валентной зоны в квантовых ямах) легких ($v=l$) и тяжелых ($v=h$) носителей; ε — энергия состояний; k_{v1} , k_{v2} — волновые векторы носителей сорта $v=l, h$ в материалах 1 и 2. Величины k_{v1} , k_{v2} (вещественные или мнимые) находятся по законам дисперсии носителей в объеме материалов 1 и 2:

$$\varepsilon_{h1,2} = \varepsilon_{v1,2} - \frac{\hbar^2 k_{h1,2}^2}{2m_h},$$

$$\frac{2}{3} P^2 k_{l1,2}^2 = (\varepsilon - \varepsilon_{v1,2}) (\varepsilon - \varepsilon_{g1,2} - \varepsilon_{v1,2}), \quad (5)$$

где в соответствии с (1), (2) $\varepsilon_{g1} = \varepsilon_g(y)$, $\varepsilon_{g2} = \varepsilon_g(x)$, $\varepsilon_{v1} = \varepsilon_{v2} + \Lambda(x, y)$. Положения краев минизон в СР $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}-\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ для ряда значений x и $y=0$ в зависимости от ширины ям d_1 при фиксированной ширине барьеров $d_2=20$ Å, полученные численным решением уравнений (3), (4), показаны на рис. 1, а—с. Для тяжелых дырок ($v=h$) уравнения (3), (4) дают обычную последовательность минизон ε_{hn} , происходящих из уровней размерного квантования в изолированных ямах. Уже при толщинах $d_1 \geq \hbar\pi/\sqrt{2}m_h\Lambda \approx 20$ Å для первых уровней тяжелых

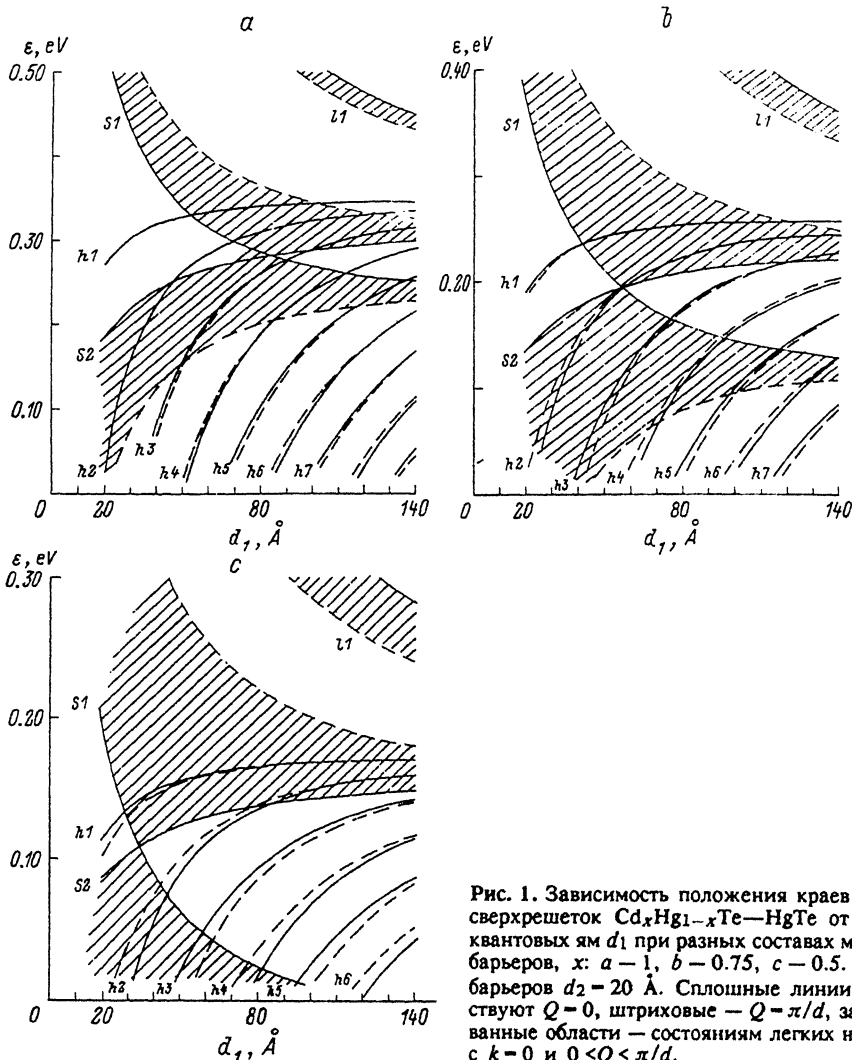


Рис. 1. Зависимость положения краев минизон сверхрешеток $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}-\text{HgTe}$ от ширины квантовых ям d_1 при разных составах материала барьеров, x : $a - 1$, $b - 0.75$, $c - 0.5$. Ширина барьеров $d_2 = 20 \text{ \AA}$. Сплошные линии соответствуют $Q = 0$, штриховые — $Q = \pi/d$, заштрихованные области — состояниям легких носителей с $k = 0$ и $0 < Q < \pi/d$.

дырок квантовую яму глубиной $\Lambda \geq 100$ мэВ можно считать бесконечно глубокой, т. е. $\varepsilon_{h_n} = \varepsilon_{v_1} - \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2m_h d_1^2$. Кроме того, из-за большого значения массы $m_h = 0.68m_0$ (m_0 — масса свободного электрона) туннелирование тяжелых дырок через барьеры несущественно, а дисперсия дырочных минизон $\varepsilon_{h_n}(Q, k)$ по Q незначительна. Для легких частиц уравнения (3), (4) дают положения краев электронных минизон ε_{l_n} при $\varepsilon > \varepsilon_{v_1}$ и минизон легких дырок в области $\varepsilon < \varepsilon_{c_1} = \varepsilon_{v_1} - |\varepsilon_{g_1}|$. Кроме того, уравнения (3), (4) с $\nu = l$ имеют два дополнительных решения ε_{S_1} и ε_{S_2} , которые при большой ширине ям и барьеров переходят в нечетную в яме (S_1) и четную (S_2) комбинацию пограничных состояний, локализованных на отдельных гетерограницах. При малых d_1 состояние S_1 расположено выше первой минизоны тяжелых дырок, является нижним из незаполненных и потому соответствует нижней электронной минизоне. С увеличением d_1 энергия состояния S_1 быстро уменьшается (рис. 1), и при

$$d_1 = \sqrt{\frac{2m_{l2}\hbar^2}{m_{l1}^2\Lambda}} \operatorname{th}(\sqrt{m_{l2}\Lambda/2} d_2/\hbar) \quad (6)$$

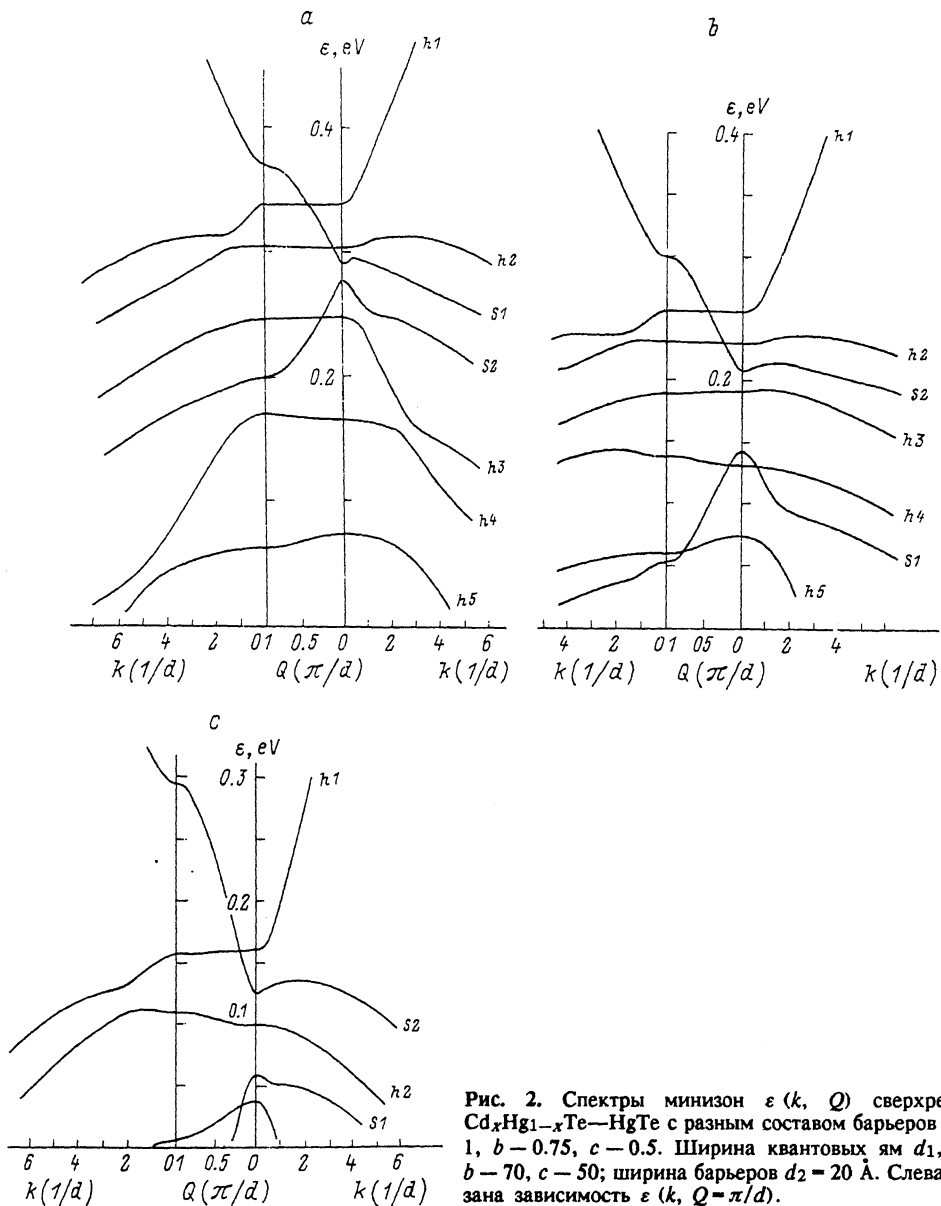


Рис. 2. Спектры минизон $\epsilon(k, Q)$ сверхрешеток $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}-\text{HgTe}$ с разным составом барьеров x : $a - 1$, $b - 0.75$, $c - 0.5$. Ширина квантовых ям d_1 , Å: $a - 70$, $b - 70$, $c - 50$; ширина барьеров $d_2 = 20$ Å. Слева показана зависимость $\epsilon(k, Q = \pi/d)$.

происходит пересечение нижнего края минизоны $S1$ (при $Q = k = 0$) с верхним краем минизоны тяжелых дырок $h1$, в результате чего СР переходит в полуметаллическую фазу с $E_g = 0$. Входящие в (б) значения масс легких дырок m_{11} , m_{12} в точке пересечения (при $\epsilon \approx \epsilon_{v1}$) определяются из (5). Края минизон (при $Q = 0, Q = \pi/d, k = 0$) достаточно плавно смещаются при уменьшении x , т. е. доли Cd в барьерах. Эти изменения связаны как с уменьшением $\epsilon_{g2} = \epsilon_g(x)$, так и с уменьшением скачка $\Lambda(x, y)$, однако первый фактор оказывается более существенным. Поэтому с уменьшением x величина d_1^* уменьшается, и переход СР в полуметаллическую фазу смещается в область малых толщин ям. Соответственно скорость изменения энергии уровня $S1$, а значит, и величины E_g

с изменением d_1 (и x) вблизи перехода в полуметаллическую фазу оказывается большой ($\delta E_g / \delta d_1 \approx 16 \hbar^2 / m_{j1} d_1^3$), что затрудняет выращивание СР типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ — HgTe с заданной величиной $E_g \leq 0.1$ эВ.

Спектр минизон СР с разным составом барьеров для полуметаллической фазы показан на рис. 2, $a-c$. После перехода в полуметаллическую фазу, когда состояние $S1$ при $Q=k=0$ и $k=0$ оказывается между минизонами $h1$ и $h2$ и вблизи $S2$, сильное расталкивание между состояниями разной четности $S1$ и $S2$, а также $S1$ и $h1$ через kP -взаимодействие приводит к тому, что масса движения носителей вдоль слоев СР для минизон $h1$ и $S1$, $m_{h1,\perp}$ и $m_{S1,\perp}$ оказывается малой: $m_{h1,\perp} \approx m_{S1,\perp} \ll m_{j1}$. Краю ε_{S1} ($Q=0, k=0$) соответствуют гиперболическая точка в спектре СР и особенность в плотности состояний. В области $d_1 > d_1^*$ за пересечением S_1 и S_2 расталкивание минизон становится слабым и массы минизон становятся порядка $m_{h1,\perp} \approx m_{S1,\perp} \approx m_{j1}$; $m_{h2} \approx m_h$. Ввиду малой дисперсии первой минизоны тяжелых частиц по Q плотность состояний вблизи уровня Ферми в полуметаллической фазе оказывается достаточно большой.

3. Спектр СР существенно перестраивается при изменении состава материала, поскольку с ростом y величина ε_{g1} быстро уменьшается и обращается в нуль при $y \approx 0.16$. При $y > 0.16$ материал квантовой ямы становится узкозонным полупроводником с $\varepsilon_{g1} > 0$, а сверхрешетка становится СР I типа. Для описания изменения спектра при этом переходе рассмотрим подробнее спектр СР типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ — $\text{Cd}_{0.16}\text{Hg}_{0.84}\text{Te}$ с $\varepsilon_{g1} = 0$. Согласно (5), (6), при $y = 16$ масса m_{j1} обращается в нуль, а точка перехода СР в полуметаллическую фазу смещается в область больших d_1 , так как $d_1^* \rightarrow \infty$. Поэтому в СР с конечными значениями d_1 и d_2 состояние $S1$ остается нижней электронной минизоной, а $S2$ — верхней минизоной легких дырок.

Зависимости положения краев минизон $S1$ и $S2$ от d_1 и d_2 следуют из решения уравнений (3), (4) с $\nu = l$. Учитывая, что в материале I легкие носители имеют в соответствии с (5) линейный закон дисперсии $\varepsilon = \varepsilon_{v1} \pm \sqrt{2/3} Pk$, для наиболее интересной области энергий $\varepsilon - \varepsilon_{v1} \ll \varepsilon_{g2}$ из (3) и (4) получим

$$\varepsilon_{S1} = \varepsilon_{v1} + \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{P}{d_1} \left(\pi \pm 2\sqrt{(\Lambda + \sqrt{2/3} \pi P/d_1)/\varepsilon_{g2}} \left[\text{th} \left(\sqrt{\frac{m_{j2}\Lambda}{2}} \frac{d_2}{\hbar} \right) \right]^{\pm 1} \right), \quad (7)$$

где знаки + и — соответствуют значениям $Q=0$ и $Q=\pi/d$. Положения краев минизоны $S2$ получаются из (7) заменой P на $-P$. Согласно (3), (4), (7), зависимость положения электронных уровней от d_1 оказывается более плавной, чем в СР типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ — HgTe . Ширина запрещенной зоны СР определяется разностью $E_g = \varepsilon_{S1} - \varepsilon_{h1}$ при $Q=k=0$. Поскольку $\varepsilon_{S1} > \varepsilon_{v1} - \varepsilon_{h1}$, выражение (7) фактически описывает зависимость $E_g(d_1, d_2)$. В частности, как следует из рис. 3, сверхрешетка с $E_g \approx 0.1$ эВ должна иметь узкозонные слои толщиной $d_1 \approx 100$ Å (в СР CdTe — HgTe , согласно рис. 1, эта ширина $d_1 \approx 35$ Å). Более плавная, чем в СР III типа, зависимость $E_g(d_1)$ при $y = 0.16$ обусловлена сильной непараболическостью закона дисперсии легких носителей в материале I и сохраняется при $\varepsilon_{g1} \neq 0$ в случае выполнения условия $E_g \gg \varepsilon_{g1}$.

На рис. 4 представлен спектр минизон СР $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$ — $\text{Cd}_{0.16}\text{Hg}_{0.84}\text{Te}$ в зависимости от импульсов Q и k . Масса $m_{S1,\perp}$ оказывается меньше массы m_{j1} в HgTe . Пользуясь выражениями работы [3] для масс легких минизон, можно показать, что она оказывается пропорциональной ширине запрещенной зоны СР и при $m_{j1} \ll m_h$ равна

$$m_{S1,\perp} = \frac{3}{2} \frac{E_g}{P^2}. \quad (8)$$

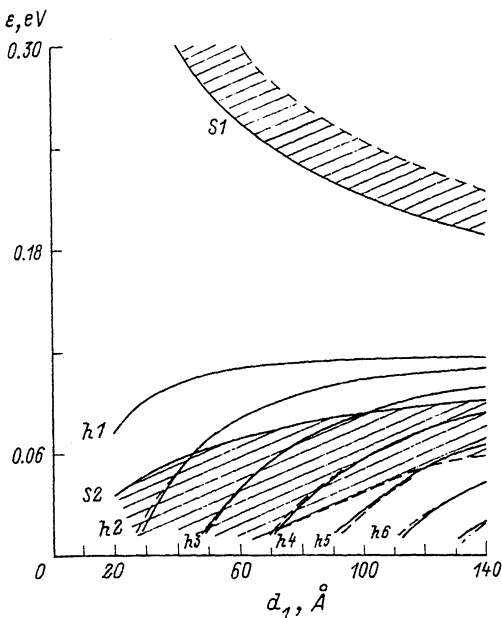


Рис. 3. Зависимость положения краев минизон сверхрешетки $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}-\text{Cd}_{0.16}\text{Hg}_{0.84}\text{Te}$ от ширины квантовых ям d_1 при ширине барьеров $d_2 = 50 \text{ \AA}$. Сплошные линии соответствуют $Q = 0$, штриховые — $Q = \pi/d$, заштрихованные области — состояниям легких носителей с $k=0$ и $0 < Q < \pi/d$.

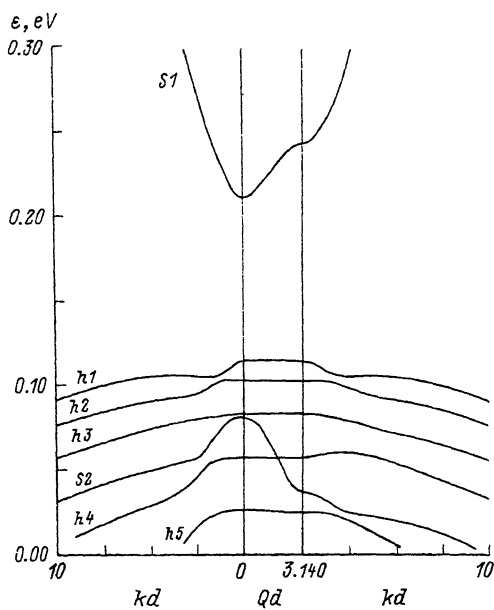


Рис. 4. Спектр минизон сверхрешетки $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}-\text{Cd}_{0.16}\text{Hg}_{0.84}\text{Te}$. Ширина квантовых ям $d_1 = 100 \text{ \AA}$, ширина барьеров $d_2 = 50 \text{ \AA}$. Справа показана зависимость $\varepsilon(k, Q = \pi/d)$.

Малая масса электронной минизоны определяет малую величину плотности состояний у края зоны. Однако для оптических свойств СР существенно, что при уменьшении E_g с ростом d_1 возрастает сила осциллятора межзонного оптического перехода $h1-S1$, $f \sim m_0 P^2 / E_g$. Поэтому коэффициент поглощения вблизи края межзонных переходов в СР с $y \approx 0.16$ слабо зависит от ширины оптической щели и по порядку величины равен $\alpha \approx e^2 / \hbar \kappa^{1/2} d_1 c$ (где κ — диэлектрическая проницаемость HgTe), т. е. оказывается того же порядка, что и в СР $\text{CdTe}-\text{HgTe}$, с той же шириной запрещенной зоны.

Выбор ширины и состава материала барьера обычно определяется требованиями к сопротивлению СР вдоль оси, т. е. к прозрачности барьеров. Как видно из рис. 3, a, b , для материала 2 с $x = 0.5$ слои толщиной $d_2 = 50 \text{ \AA}$ оказываются достаточно прозрачными для легких носителей, так как дисперсия минизон легких частиц по Q оказывается порядка $\varepsilon_{S1}(Q = \pi/d) - \varepsilon_{S1}(Q = 0) = 25 \text{ мэВ}$.

Таким образом, в работе показано, что использование для создания СР чувствительной в далекой ИК области структуры типа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}-\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ с оптимальным составом слоев ям и барьеров позволяет заметно смягчить требования к толщине и качеству материала слоев, поскольку в такой СР малые значения E_g и достаточная ширина минизон могут быть реализованы при толщинах слоев $d_1 \approx 100$, $d_2 \approx 50 \text{ \AA}$, когда относительные флуктуации параметров слоев становятся менее существенными.

Авторы благодарны С. А. Мартынову за помощь в проведении численных расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] N. F. Johnson, P. M. Hui, H. Ehrenreich. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 1933 (1988).
- [2] J. H. Meyer, C. A. Hoffman, F. J. Bartoli, J. W. Han, J. W. Cook, Jr., J. F. Schetzina, X. Chu, J. P. Faurie, J. N. Schulman. *Phys. Rev. B*, **38**, 2204 (1988).
- [3] Л. Г. Герчиков, Г. В. Рожнов, А. В. Субашиев. *ЖЭТФ*, **101**, 286 (1992).
- [4] M. Voos et al. *Superlattices and Microstructures*, **8**, 167 (1990).
- [5] Л. Г. Герчиков, А. В. Субашиев, Салман Далла. *ФТП*, **26**, 882 (1992).
- [6] D. H. Smith, T. C. McGill, J. N. Schulman. *Appl. Phys. Lett.*, **43**, 180 (1983).
- [7] M. A. Herman, M. Pessa. *J. Appl. Phys.*, **57**, 2671 (1985).
- [8] G. L. Hansen, J. L. Schit, T. N. Casselman. *J. Appl. Phys.*, **53**, 7099 (1982).
- [9] N. F. Johnson, P. M. Hui, H. Ehrenreich. *Phys. Rev. B*, **43**, 12057 (1991).
- [10] C. A. Hoffman, J. H. Meyer, F. J. Bartoli, J. W. Han, J. W. Cook, Jr., J. F. Schetzina, J. N. Schulman. *Phys. Rev. B*, **39**, 5208 (1989).

Редактор В. В. Чалдышев
