

УДК 621.315.592

XXII Международный симпозиум „Нанопизика и наноэлектроника“,
Нижний Новгород, 12–15 марта 2018 г.

Расчет состояний многозарядных примесно-дефектных центров в эпитаксиальных слоях $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

© Д.В. Козлов^{1,2}, В.В. Румянцев^{1,2}, С.В. Морозов^{1,2}, А.М. Кадыков¹, М.А. Фадеев¹,
Н.-В. Hübers³, В.И. Гавриленко^{1,2}

¹ Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

² Нижегородской государственной университет им. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

³ Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin,
12489 Berlin, Germany

E-mail: dvkoz@ipmras.ru

(Получена 25 апреля 2018 г. Принята к печати 7 мая 2018 г.)

Разработан метод расчета состояний многовалентных доноров и акцепторов в $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ материалах. Рассчитаны энергии ионизации глубоких акцепторных и донорных центров в эпитаксиальных $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ -пленках. Метод расчета учитывал влияние как валентной зоны, так и зоны проводимости на состояния примесно-дефектных центров. Проведенные расчеты энергий уровней четырехвалентных акцепторов и доноров, связанных с дефектами кристаллической структуры, указывают на межзонную природу линий, наблюдаемых ранее в спектрах фотолюминесценции $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ -пленок.

DOI: 10.21883/FTP.2018.11.46579.01

1. Введение

Одной из проблем при создании приемников высокой чувствительности для дальнего инфракрасного диапазона длин волн на основе эпитаксиальных пленок $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (КРТ) является существенное влияние примесных и дефектных центров на времена межзонной рекомбинации. Состояния таких центров в КРТ структурах исследуются на протяжении четырех десятилетий. Так, в ранних работах в слоях КРТ были обнаружены состояния вблизи края валентной зоны (акцепторные центры) [1]. Как показали наши недавние исследования [2], такие мелкие акцепторные центры с энергией ионизации 10–20 мэВ являются вакансиями ртути. Также в ряде работ [3–5] представлены результаты по наблюдению в спектрах фотолюминесценции и модуляционной спектроскопии переходов между глубокими примесно-дефектными центрами и мелкими акцепторными уровнями вблизи потолка валентной зоны. В этих работах исследовались нелегированные КРТ пленки с остаточной проводимостью *n*-типа.

На рис. 1 представлены данные, взятые из работ [3–5], показывающие положение линий в спектре фотолюминесценции (ФЛ) при различных значениях доли кадмия в твердом растворе КРТ пленки (символы). Рост ширины запрещенной зоны с ростом доли кадмия в растворе показан линией на рис. 1. Следует выделить две группы линий, положение которых представлено на рис. 1. Спектральное положение одних линий (квадраты

и кружки на рис. 1) с ростом доли кадмия в КРТ пленке „следует“ за шириной запрещенной зоны. Эти линии связаны с переходами между дискретными состояниями в запрещенной зоне, относящимися к разным зонам, т. е. между состояниями доноров и акцепторов. Положение других линий (треугольники на рис. 1) мало меняется

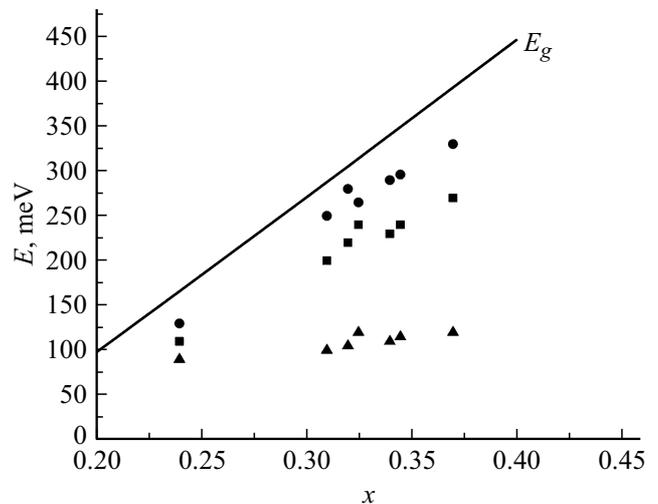


Рис. 1. Сводные данные, взятые из работ [3–5]: положение трех особенностей в спектрах ФЛ КРТ структур в зависимости от доли кадмия в растворе (символы). Сплошная линия соответствует ширине запрещенной зоны — красной границе полосы межзонной ФЛ.

при изменении состава КРТ пленки. Эти особенности связаны с переходами между дискретными состояниями в запрещенной зоне, относящимися к одной зоне, т.е. между состояниями глубоких и мелких акцепторов.

Следует отметить, что до сих пор не выяснена природа описанных выше глубоких центров. В КРТ пленках такие центры могут быть связаны как с дефектами кристаллической решетки, так и с остаточными примесями, продифундировавшими в процессе роста из подложки в пленку КРТ. Последнее характерно для КРТ пленок, выращенных на подложках GaAs — галлий может встраиваться в подрешетку теллура и создавать таким образом трехвалентные акцепторные центры [6]. Однако авторы [3–5] исследовали КРТ пленки, выращенные на подложках CdTe, поэтому, поскольку подложка не являлась источником химических примесей, остаточных примесей других химических элементов должно быть немного. Настоящая работа посвящена теоретическому расчету энергий состояний различных многозарядных донорных и акцепторных центров в КРТ, возникающих из-за дефектов кристаллической решетки. Ранее энергии состояний мелких многозарядных центров — двухвалентных акцепторов — рассчитывались авторами настоящей работы в [2]. При расчете состояний дырок на таких центрах, энергия ионизации которых значительно меньше ширины запрещенной зоны, пренебрегали влиянием зоны проводимости. Однако, при описании глубоких центров, энергия ионизации которых сравнима с шириной запрещенной зоны, необходимо учитывать влияние на состояния как акцепторов, так и доноров, и валентной зоны, и зоны проводимости.

2. Методика исследования

2.1. Примесно-дефектные центры в КРТ структурах, их валентность и зарядовые состояния

Причиной появления дефектов в КРТ материалах является слабость химической связи Hg–Te. Из-за слабости этой связи атомы ртути и теллура могут перемещаться по кристаллу. При таком перемещении могут возникать следующие дефекты.

1) Вакансии ртути. При появлении такого дефекта в валентной зоне не хватает двух электронов, а заряд самого дефекта относительно кристаллической решетки равен $-2e$ (на месте двукратно заряженного иона ртути в кристаллической решетке оказывается незаряженная вакансия). Вакансия ртути является двухзарядным (двухвалентным) акцептором. Такой дефект исследовался во многих работах [2,7,8].

2) Антиструктурный теллур. Этот дефект упоминается в работах [6,9]. Он возникает при встраивании атома теллура в подрешетку ртути. Атом теллура имеет 6 валентных электронов и, замещая двухвалентный атом ртути, отдает в зону проводимости четыре „лишних“ электрона. Такой дефект является четырехзарядным или четырехвалентным донором.

3) Антиструктурная ртуть или антиструктурный кадмий. Нужно отметить, что нами не обнаружено ни одной работы об упоминании такого дефекта. Этот дефект может возникать при встраивании атомов ртути или кадмия в подрешетку теллура. При замещении шестивалентного атома Te двухвалентным Cd (или Hg) в валентной зоне не хватает четырех электронов, и дефект оказывается четырехзарядным акцептором.

Состояния двухвалентных акцепторов были рассчитаны в работе [2]. В настоящей работе рассчитаны энергетические состояния четырехвалентных доноров и акцепторов.

Многозарядные акцепторы и доноры могут находиться в нескольких зарядовых состояниях, которые будем обозначать следующим образом: $A(D)_n^i$ — буква A или D — акцепторный или донорный центр соответственно, нижний индекс — максимальный заряд центра, верхний индекс — заряд центра, зависящий от того, сколько частиц присоединено к донору или акцептору. Четырехвалентный примесно-дефектный центр может находиться в пяти зарядовых состояниях: донорный центр — в зарядовых состояниях $D_4^0, D_4^{+1}, D_4^{+2}, D_4^{+3}$ и D_4^{+4} , когда с донором связаны 4, 3, 2, 1 и 0 электронов соответственно; акцепторный центр — в зарядовых состояниях $A_4^0, A_4^{-1}, A_4^{-2}, A_4^{-3}$ и A_4^{-4} , когда с акцептором связаны 4, 3, 2, 1 и 0 дырок соответственно, или при „электронном“ описании акцепторных центров — с акцептором связаны соответственно от 0 до 4 электронов. Двухвалентный акцептор может находиться в трех зарядовых состояниях $A_2^0, A_2^{-1}, A_2^{-2}$, когда с центром связаны соответственно две, одна и ни одной дырки.

Если донорный центр теряет электрон, то заряд такого центра увеличивается на единицу — можно говорить об ионизации донора. Акцепторный центр ионизируется, если захватывает электрон. При ионизации и донорного, и акцепторного центров должна быть поглощена энергия, равная энергии ионизации центров. Если электрон со дна зоны проводимости переходит на край валентной зоны, выделяется энергия, равная ширине запрещенной зоны, тогда, если электрон переходит с донорного центра на акцепторный, происходит ионизация обоих центров, и при этом выделяется энергия:

$$E = E_g - (E_D + E_A), \quad (1)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны, E_D и E_A — энергии ионизации донорного и акцепторного центров соответственно.

Если электрон переходит между состояниями акцепторных центров, находящихся допустим в зарядовых состояниях A_4^{-n} и A_2^{-l} , то первый центр теряет энергию, равную энергии ионизации A_4^{-n+1} центра, а второй приобретает энергию, равную энергии ионизации A_2^{-l} , таким образом выделяется энергия, равная разнице этих энергий ионизации:

$$E = E(A_4^{-n+1}) - E(A_2^{-l}). \quad (2)$$

Для определения энергий переходов между различными примесными центрами был выполнен расчет энергий ионизации четырехвалентных донорных и акцепторных центров в различных зарядовых состояниях.

2.2. Расчет энергий ионизации примесно-дефектных центров

Энергия ионизации центра, с которым связано n носителей заряда (электронов или дырок), — это разница энергии n и $n-1$ носителей, локализованных на центре. Необходимо рассчитать энергии состояний нескольких носителей на центре. Эта задача решалась методом, развитым в [2] для расчета состояний двух дырок на двухвалентном акцепторном центре — вакансии ртути.

Для расчета многочастичных состояний использовался метод Хартри. Состояние каждой частицы рассматривалось в поле иона примесно-дефектного центра и других частиц, при этом решаются одночастичные уравнения Шредингера для каждой из частиц, локализованных на центре. Такая система уравнений решалась методом последовательных приближений, при этом в качестве первого шага используются уравнения состояний носителей без учета поля других частиц.

Следует отметить, что носители на донорных и акцепторных центрах по-разному распределяются по одночастичным уровням. Основное состояние дырки на акцепторном центре в полупроводнике с кристаллической решеткой типа цинковой обманки (этот тип решетки имеют и КРТ материалы) является четырехкратно вырожденным. Поэтому нижнее энергетическое состояние четырехвалентного акцепторного центра, находящегося в любом из возможных зарядовых состояний, реализуется, когда все дырки, локализованные на акцепторе, находятся на основном уровне. Основное состояние доноров в КРТ — двукратно вырождено, поэтому все электроны на D_4^{+2} , D_4^{+3} -центрах находятся на нижних уровнях, а на D_4^0 , D_4^{+1} — по два носителя на нижнем $1s$ состоянии, а третий и четвертый электроны вследствие принципа запрета Паули оказываются на возбужденных уровнях. Это значит, что энергии отрыва одного электрона от D_4^0 - и D_4^{+2} -центров (энергии ионизации) оказываются невелики.

Расчет одночастичных состояний как электронов, так и дырок проводился в приближении эффективной массы, без учета химического сдвига, в рамках трехзонной модели, учитывающей две дырочные подзоны и одну электронную, при этом уравнение для огибающих включало потенциал иона примесно-дефектного центра и гамильтониан, описывающий кинетическую энергию носителей (H_k), являющийся матрицей 6×6 , включающей гамильтониан Латтинджера, описывающий состояния дырок в валентной зоне (H_V), часть, описывающую состояния носителей в зоне проводимости (H_C), и элементы, описывающие взаимодействие

двух зон (H_{int}):

$$H_k = H_V + H_C + H_{int} \quad (3)$$

$$H_V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F & H & I & 0 \\ 0 & 0 & H^* & G & 0 & I \\ 0 & 0 & I^* & 0 & G & -H \\ 0 & 0 & 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix},$$

$$H_C = \begin{pmatrix} (2N+1)\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (2N+1)\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$H_{int} = \frac{\hbar^2 P}{2m} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -k_- & \frac{1}{\sqrt{6}}k_z & \frac{1}{\sqrt{3}}k_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{6}}k_z & k_- \\ -k_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}}k_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}k_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}k_+ & \frac{1}{\sqrt{6}}k_z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times$$

Использовалось сферическое приближение, при котором элементы представленных выше матриц имеют вид:

$$F = E_V + \frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \gamma(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)),$$

$$G = E_V + \frac{\hbar^2}{2m} (\gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \gamma(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)),$$

$$H = 2\sqrt{3}\gamma \frac{\hbar^2 k_z k_-}{2m},$$

$$H = \sqrt{3}\gamma \frac{\hbar^2 k_-}{2m},$$

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y,$$

где $\gamma = \frac{2\gamma_2 + 2\gamma_3}{5}$, m — масса свободного электрона. Значения используемых параметров $\gamma_{1,2,3}$, P и N для HgTe и CdTe, взятые из [10], представлены в таблице. Для твердого раствора КРТ эти параметры находили с использованием линейной интерполяции между соответствующими значениями параметров в HgTe и CdTe. Величина ширины запрещенной зоны, использованная для расчета состояний доноров и акцепторов при различных значениях доли кадмия в КРТ пленке, была взята из [3]. Отметим, что эта ширина запрещенной

Значения используемых зонных параметров $\gamma_{1,2,3}$, P и N для HgTe и CdTe [10]

| | γ_1 | γ_2 | γ_3 | N | $\frac{2mP^2}{\hbar^2}$, эВ |
|------|------------|------------|------------|-------|------------------------------|
| HgTe | 4.1 | 0.5 | 1.3 | 0 | 18.8 |
| CdTe | 1.7 | -0.28 | 0.03 | -0.09 | 18.8 |

зоны соответствует температуре $T = 98$ К. Приведенная выше матрица является гамильтонианом Кейна, в котором пренебрегли спин-отщепленной дырочной подзоной. И действительно, величина спин-орбитального расщепления в КРТ материалах составляет около 1 эВ, что значительно превышает ширину запрещенной зоны в исследуемых материалах, кадмия в которых меньше 40%.

При решении уравнения с гамильтонианом (3) кулоновским потенциалом дефектного центра волновая функция носителя раскладывалась по базису из собственных функций гамильтониана $H_0 = H_V + H_C$ (не учитывающего взаимодействие валентной зоны и зоны проводимости). Подставляя такое разложение в уравнение для огибающих, получим интегральное уравнение для коэффициентов разложения, которое будем решать, заменяя интеграл дискретной суммой, как описано в [11].

Известно, что основное состояние одной дырки на акцепторном центре в полупроводнике с кристаллической решеткой типа цинковой обманки (этот тип решетки имеют и КРТ материалы) является четырехкратно вырожденным. При этом волновой вектор — функция дырки, взаимодействующей с таким акцепторным центром, является решением уравнения для огибающих волновых функций.

3. Результаты расчетов и обсуждение

На рис. 2 представлены рассчитанные энергии ионизации четырехвалентных акцепторных (рис. 2, *a*) и донорных (рис. 2, *b, c*) центров в зависимости от доли кадмия (x) в КРТ материале. Серыми линиями на рис. 2, *a* показаны энергии ионизации двухвалентных акцепторных центров — вакансий ртути, рассчитанные методом, описанным в [2].

Линии на рис. 2, *c* представляют энергии отрыва первых двух электронов от D_4 -центра (энергии ионизации D_4^0 - и D_4^{+1} -центров). Видно, что такая энергия составляет порядка нескольких мэВ. Энергии отрыва оставшихся двух электронов (энергии ионизации D_4^{+2} - и D_4^{+3} -центров) показаны на рис. 2, *b*. Видно, что состояния таких центров, как и было отмечено выше, являются глубокими. Следует отметить, что исследуемые в [3–5] КРТ структуры имеют проводимость n -типа, и уровень Ферми в таких образцах должен находиться вблизи края зоны проводимости. Следует также отметить, что энергии ионизации D_4^0 - и D_4^{+1} -центров меньше кТ при

98 К (8.5 мэВ), и электроны при такой температуре с мелких донорных состояний перейдут в зону проводимости. Глубокие состояния доноров (состояния D_4^{+2} -

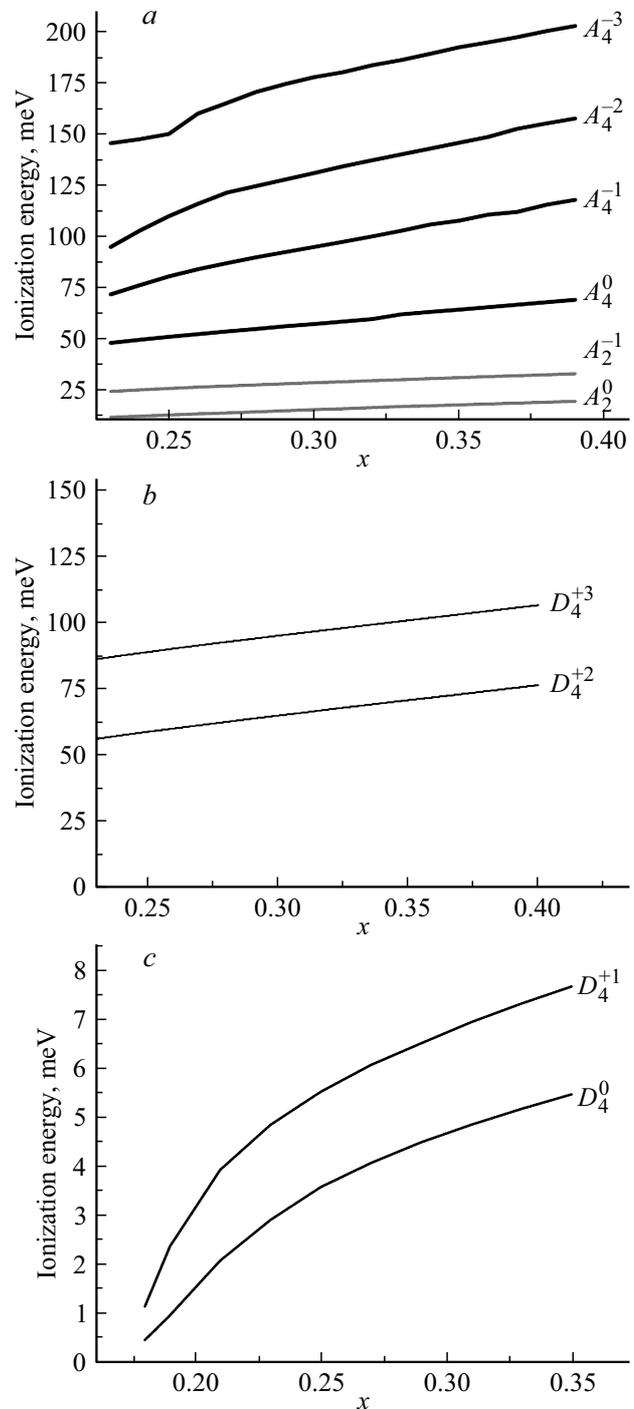


Рис. 2. Энергии ионизации акцепторных (*a*) и донорных (*b, c*) центров в зависимости от доли кадмия в растворе. Расчет проводился при температуре $T = 98$ К. Серые линии — энергии ионизации вакансии ртути — двухвалентного акцептора, рассчитанные методом, изложенным в [2], с учетом химического сдвига. Черные линии — энергии ионизации четырехвалентных центров, при расчете которых химический сдвиг не учитывался.

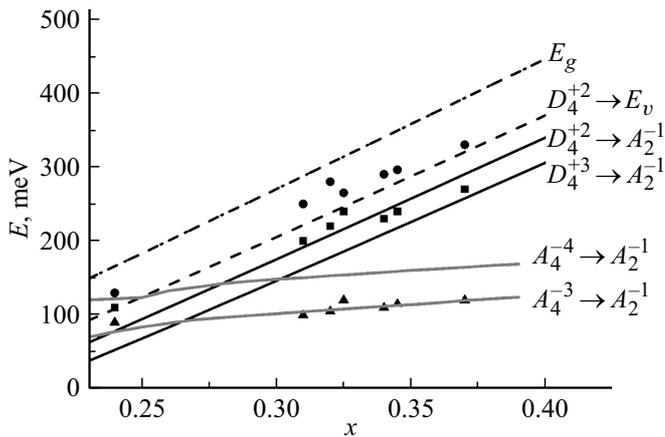


Рис. 3. Положение линий в спектре ФЛ из [3-5] (символы) и рассчитанные энергии переходов электронов с уровней четырехвалентных донорных (черные линии) и акцепторных (серые линии) центров в зависимости от доли кадмия в КРТ пленке. Сплошными линиями представлены энергии переходов носителей на состояния A_2^{-1} -центров. Пунктирной линией показан наиболее коротковолновый из возможных переходов электрона с донорного уровня — переход с уровня D_4^{+2} -центра в валентную зону. Штрихпунктирная линия показывает ширину изменения ширины запрещенной зоны при росте доли кадмия в растворе.

и D_4^{+3} -центров), энергия связи которых много больше 8.5 мэВ (см. рис. 2, b), будут полностью заполнены электронами, т.е. донорные центры будут находиться в зарядовом состоянии D_4^{+2} . При этом также будут полностью заполнены электронами и акцепторные центры, т.е. четырехвалентные и двухвалентные акцепторы должны быть в зарядовых состояниях A_4^{-4} и A_2^{-2} соответственно. Излучение накачки забрасывает электроны с состояний в запрещенной зоне в зону проводимости. В результате заряд некоторого количества центров увеличивается на единицу и после подсветки акцепторные и донорные центры распределяются по зарядовым состояниям следующим образом:

- 1) вакансии ртути — в зарядовых состояниях A_2^{-2} и A_2^{-1} ;
- 2) A_4 -центры — в зарядовых состояниях A_4^{-4} и A_4^{-3} ;
- 3) D_4 -центры находятся в зарядовых состояниях D_4^{+2} и D_4^{+3} .

Авторы работ [3–5] связывали наблюдаемые особенности в спектрах ФЛ с переходами электронов между состояниями глубоких центров и состояниями мелких акцепторов, которые, как было показано в [2], являются вакансиями ртути. Как было показано выше, вакансии ртути находятся в зарядовых состояниях A_2^{-2} и A_2^{-1} . На A_2^{-2} -центры переходы электронов невозможны, поскольку состояния этих центров электронами полностью заполнены. Электроны переходят на уровни вакансий ртути, находящихся в зарядовом состоянии A_2^{-1} .

Таким образом, в спектре ФЛ могут наблюдаться следующие переходы электронов: $A_4^{-4} \rightarrow A_2^{-1}$, $A_4^{-3} \rightarrow A_2^{-1}$ —

переходы между состояниями акцепторных центров и $D_4^{+2} \rightarrow A_2^{-1}$, $D_4^{+3} \rightarrow A_2^{-1}$ — переходы между состояниями донорных и акцепторных центров. Энергии этих переходов представлены на рис. 3.

Видно, что энергии переходов с донорных состояний на уровни мелких акцепторов хорошо согласуются с положением линий ФЛ из работ [3–5]. Энергия перехода $A_4^{-3} \rightarrow A_2^{-1}$ практически совпадает с положением спектральных линий ФЛ (треугольники на рис. 3). Следует отметить, что более коротковолновый переход $A_4^{-4} \rightarrow A_2^{-1}$ между акцепторными состояниями должен был оказаться мощнее перехода $A_4^{-3} \rightarrow A_2^{-1}$ (поскольку A_4^{-3} -центры отсутствуют без накачки и их ожидаемо много меньше, чем A_4^{-4} -центров), и логично было бы предположить, что именно он ответствен за длинноволновую особенность в спектре ФЛ, а переход $A_4^{-3} \rightarrow A_2^{-2}$ вследствие слабости отсутствует. Однако энергия такого перехода заметно больше энергии фотонов, соответствующих положению длинноволновой линии ФЛ (см. рис. 3). Такое расхождение может быть связано с влиянием химического сдвига на акцепторные уровни, которое, как показано в [2], может быть существенным.

4. Заключение

Сопоставление рассчитанных энергий переходов между состояниями глубоких центров с положением линий в спектрах ФЛ КРТ структур, взятым из опубликованных ранее работ, позволило сделать предположение, что наблюдаемые линии связаны с переходами с участием четырехвалентных донорных и акцепторных центров, которые могут быть связаны с дефектами кристаллической решетки КРТ структуры, при этом расчет состояний таких центров был выполнен в приближении эффективной массы без учета возможного химического сдвига.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 17-12-01360).

Список литературы

- [1] W. Scott, E.L. Stelzer, R.J. Hager. J. Appl. Phys., **47**, 1408 (1976).
- [2] V.V. Rumyantsev, D.V. Kozlov, S.V. Morozov, M.A. Fadeev, A.M. Kadykov, F. Teppe, V.S. Varavin, M.V. Yakushev, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretckii, V.I. Gavrilenko. Semicond. Sci. Technol., **32**, 095007 (9pp) (2017).
- [3] D.L. Polla, R.L. Aggarwal, J.A. Mroczkowski, J.F. Shanley, M.B. Reine. Appl. Phys. Lett., **40**, 338 (1982).
- [4] D.L. Polla, R.L. Aggarwal, D.A. Nelson, J.F. Shanley, M.B. Reine. Appl. Phys. Lett., **43**, 941 (1983).
- [5] D.L. Polla, R.L. Aggarwal. Appl. Phys. Lett., **44**, 775 (1984).
- [6] К.Д. Мынбаев, В.И. Иванов-Омский. ФТП, **40**, 3 (2006).
- [7] К.Д. Мынбаев, А.В. Шилиев, Н.Л. Баженов, А.И. Ижнин, И.И. Ижнин, Н.Н. Михайлов, В.С. Варавин, С.А. Дворецкий. ФТП, **49**, 3 (2015).

- [8] И.И. Ижнин, А.И. Ижнин, К.Д. Мынбаев, Н.Л. Баженов, Е.И. Фицыч, М.В. Якушев, Н.Н. Михайлов, В.С. Варавин, С.А. Дворецкий. ФТП, **48**, 207 (2014).
- [9] В.С. Варавин, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов. Автометрия, **3**, 9 (2001).
- [10] E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr. Phys. Rev. B, **72**, 035321 (2005).
- [11] В.Я. Алешкин, Б.А. Андреев, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов. ФТП, **34**, 582 (2000).

Редактор Г.А. Оганесян

The calculation of multiply charged states of impurity-defect centers in epitaxial $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ layers

D.V. Kozlov^{1,2}, V.V. Rumyantsev^{1,2}, S.V. Morozov^{1,2}, A.M. Kadykov¹, M.A. Fadeev¹, H.-W. Hübers³, V.I. Gavrilenko^{1,2}

¹ Institute for Physics of Microstructures
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

² Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

³ Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin,
12489 Berlin, Germany

Abstract A method of calculation of eigenenergies of the states of multivalent donors and acceptors in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ materials has been developed. The ionization energy of the deep acceptor and donor centers in epitaxial $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films have been calculated. The calculation method took into account the influence of both the valence band and the conduction band on the wave functions of the impurity states. We assume that optical transitions observed earlier in the photoluminescence spectra of such $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films are intracenter impurity transitions of quadrivalent acceptors and donors associated with defects in a crystal structure.