

Спектр двойных акцепторов в слоях барьеров и квантовых ям гетероструктур HgTe/CdHgTe

© Д.В. Козлов^{1,2}, В.В. Румянцев^{1,2}, С.В. Морозов^{1,2}

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

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

E-mail: dvkoz@ipmras.ru

Поступила в Редакцию 24 апреля 2019 г.

В окончательной редакции 29 апреля 2019 г.

Принята к публикации 29 апреля 2019 г.

Проведено теоретическое исследование состояний двойных акцепторов в гетероструктурах HgTe/CdHgTe с квантовыми ямами, учитывающее существенную разницу значений диэлектрической проницаемости слоев барьеров и квантовых ям. Влияние такой разницы и возникающего из-за нее наведенного на гетерограницах заряда описывалось с помощью потенциала зарядов-изображений. Расчет показал существенное изменение энергии связи акцепторных центров — вакансий ртути из-за наведенного заряда, при этом энергии ионизации вакансий ртути хорошо согласуются с положением спектральных особенностей в спектре фотолюминесценции гетероструктур HgTe/CdHgTe с квантовыми ямами.

Ключевые слова: гетероструктуры, двойные акцепторы, дефекты, вакансии ртути, фотолюминесценция, КРТ структуры.

DOI: 10.21883/FTP.2019.09.48128.11

1. Введение

Уже давно наблюдается интерес к терагерцовому излучению, возникающему за счет переходов с участием мелких примесей в полупроводниках и полупроводниковых структурах с квантовыми ямами (КЯ) [1,2]. Такие структуры являются перспективным материалом для создания источников терагерцового излучения, работающих на оптических переходах между примесными состояниями. До недавнего времени исследования примесей и дефектов проводились в основном в наиболее распространенных и используемых полупроводниковых гетероструктурах на основе таких материалов, как Ge, GaAs [3], Si [4]. Данная работа является продолжением серии исследований примесно-дефектных центров в гетероструктурах и посвящена расчетам спектра акцепторов в гетероструктурах HgTe/CdHgTe с квантовыми ямами. Самым распространенным акцептором для таких материалов оказывается вакансия ртути. Она является двухвалентным акцептором и может находиться в трех зарядовых состояниях: нейтральный A^0 -центр, с которым связаны две дырки, A^{-1} -центр, с которым связана одна дырка, и не имеющий дырок полностью ионизованный A^{-2} -центр. Из-за таких вакансий возникают особенности в спектрах левее полосы межзонных переходов, появляющиеся из-за переходов носителей из валентной зоны на локализованные состояния акцепторов в запрещенной зоне. Фотопроводимость (ФП), связанная с переходами с участием акцепторных состояний, возникает благодаря переходам дырок с акцепторных центров в валентную зону. При этом в формировании такого сигнала A^{-2} -центры не участвуют (так как на таких центрах

нет дырок), а из-за переходов дырок с состояний A^0 - и A^{-1} -центров в валентную зону в спектре ФП возникают линии, положение которых соответствует энергиям ионизации таких центров (обозначим эти энергии E_1 и E_2 соответственно). Фотолюминесценция (ФЛ), связанная с акцепторными центрами, возникает (примесно-дефектная ФЛ), напротив, благодаря захвату дырок из валентной зоны на акцепторные центры. При этом в формировании сигнала не участвует полностью заполненный дырками нейтральный A^0 -центр, а при захвате носителей на A^{-1} - и A^{-2} -центры испускаются фотоны с энергией, равной соответственно энергии ионизации A^0 -центра (E_1) и A^{-1} -центра (E_2). Примесно-дефектная ФЛ наблюдалась как в объемных КРТ (кадмий-ртути-теллур) пленках, так и в HgTe/CdHgTe с КЯ [5]. Для интерпретации наблюдаемых спектров ФЛ и ФП проводились расчеты энергий ионизации вакансий ртути — A^0 -центров (E_1) и A^{-1} -центров (E_2) [5–7]. Так, в работе [5] проведен расчет спектра двухвалентных акцепторов в объемных КРТ пленках. В работах [6,7] рассчитывался спектр состояний вакансии ртути в HgTe/CdHgTe с КЯ при различных положениях иона акцептора в структуре. В этих работах диэлектрическая проницаемость полагалась однородной по всей гетероструктуре. Однако диэлектрические проницаемости слоев барьеров типичных исследуемых гетероструктур (например, $Hg_{0.3}Cd_{0.7}Te$ в [7]) и квантовых ям (HgTe) существенно отличаются (составляют соответственно 12.5 и 20.8). Из-за этого на гетерогранице возникает существенный наведенный заряд, который оказывает заметное влияние на потенциал, действующий на носители. В настоящей работе проведен теоретический расчет состояний ва-

кансий ртути в гетероструктурах HgTe/CdHgTe с КЯ, учитывающий такой наведенный заряд.

2. Расчет состояний вакансий ртути в гетероструктурах HgTe/CdHgTe с квантовыми ямами

Были рассчитаны энергии состояний одной (одночастичные состояния) и двух (двухчастичное состояние) дырок, связанных на вакансии ртути при различных расположениях дефекта в гетероструктуре, т.е. найдены энергии отрыва первой и второй дырок от такой вакансии (энергии ионизации A^0 - и A^{-1} -центров). Расчет проводился k - p -методом. Гамильтониан уравнения для огибающих волновых функций дырок записывался в виде суммы пяти слагаемых: кинетической энергии (гамильтониан Латтинжера), энергии кулоновского взаимодействия с заряженным акцептором, энергии кулоновского взаимодействия с наведенными зарядами на границе слоев барьеров и КЯ, ограничивающего потенциала квантовой ямы и дополнительного отталкивающего потенциала, существенного вблизи акцепторного центра и описывающего потенциал центральной ячейки (ПЦЯ) [7,8]. При расчетах использовалось аксиальное приближение, т.е. не учитывалась анизотропия закона дисперсии дырок в плоскости, квантовой ямы. Для этого в элементах гамильтониана Латтинжера опущены слагаемые, ответственные за такую анизотропию [6]. Значения параметров Латтинжера и диэлектрической проницаемости в твердом растворе находились линейной интерполяцией между соответствующими значениями параметров в HgTe и CdTe, взятых из работы [9].

Потенциал наведенных на границе слоев зарядов, возникающий из-за разной диэлектрической проницаемости слоев гетероструктуры, описывают с помощью зарядов изображений. На рис. 1 показана система зарядов, создающая электростатическое поле в двух полубесконечных средах с разными диэлектрическими проницаемостями. На рис. 1, *a*, представляющем заряды, создающие поле в области I (т.е. в среде, в которую помещен внешний заряд), показан внешний заряд (черный кружок) и заряд-изображение (серый кружок). Заряд-изображение расположен симметрично внешнему заряду относительно границы раздела сред, и его величина равна

$$q(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2), \quad (1)$$

где q — величина внешнего заряда, ε_1 и ε_2 — диэлектрические проницаемости сред. На рис. 1, *b* показаны заряды, создающие поле в области II. Следует отметить, что положения внешнего заряда и заряда-изображения, создающего поле в этой области, совпадают. В результате оказывается, что в области II электрическое поле создается эффективным зарядом величиной

$$2q\varepsilon_1/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2). \quad (2)$$

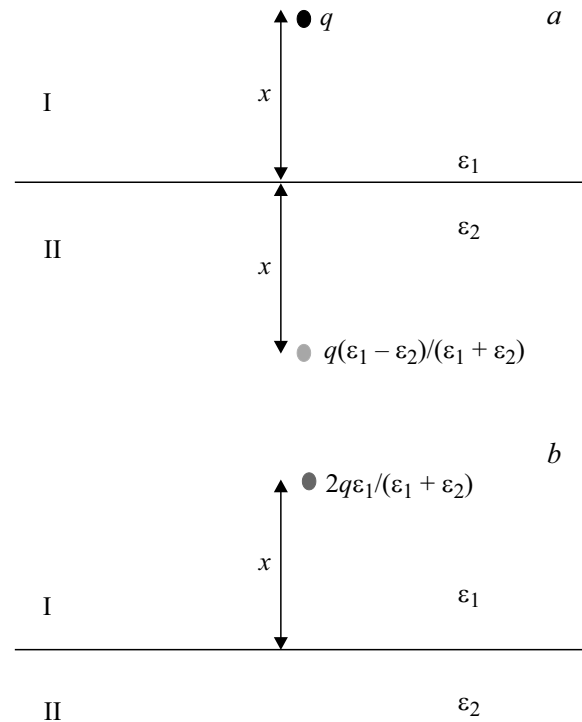


Рис. 1. Схема, показывающая заряды, создающие электростатическое поле в двух полубесконечных средах с разными диэлектрическими проницаемостями: *a* — заряды, создающие поле в области I; *b* — представлены заряды, создающие поле в области II. Черным показан внешний заряд, серым — заряд-изображение, темно-серым — „эффективный“ заряд на рис. 1, *b*, x — расстояние от внешнего заряда до раздела сред. Отмечены величины зарядов.

Рассмотрим систему зарядов-изображений, создающих электрическое поле в слое с диэлектрической проницаемостью ε_1 , разделяющем полубесконечные среды с диэлектрической проницаемостью ε_2 . Такая модель описывает электростатический потенциал, возникающий при внесении иона примеси в структуру HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te, состоящей из квантовой ямы (в слое HgTe) шириной 48 Å, окруженной толстыми, толщиной 300 Å, барьерами (слоями Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te). На рис. 2 показаны внешний заряд и заряды-изображения, создающие электрические поля в слое КЯ такой гетероструктуры (в слое с большей диэлектрической проницаемостью ε_1) при помещении внешнего заряда в слой КЯ (рис. 2, *a*) и в слой барьера (рис. 2, *b*). Видно, что при любом расположении внешнего заряда возникает последовательность зарядов-изображений. Возникает такая последовательность следующим образом:

„Заряды-изображения“ возникают для каждой из двух гетерограниц.

„Заряд-изображение“ для одной первой границы является внешним зарядом для второй границы и для нее возникает изображение такого заряда (изображение изображения), которое в свою очередь оказывается уже внешним зарядом для первой.

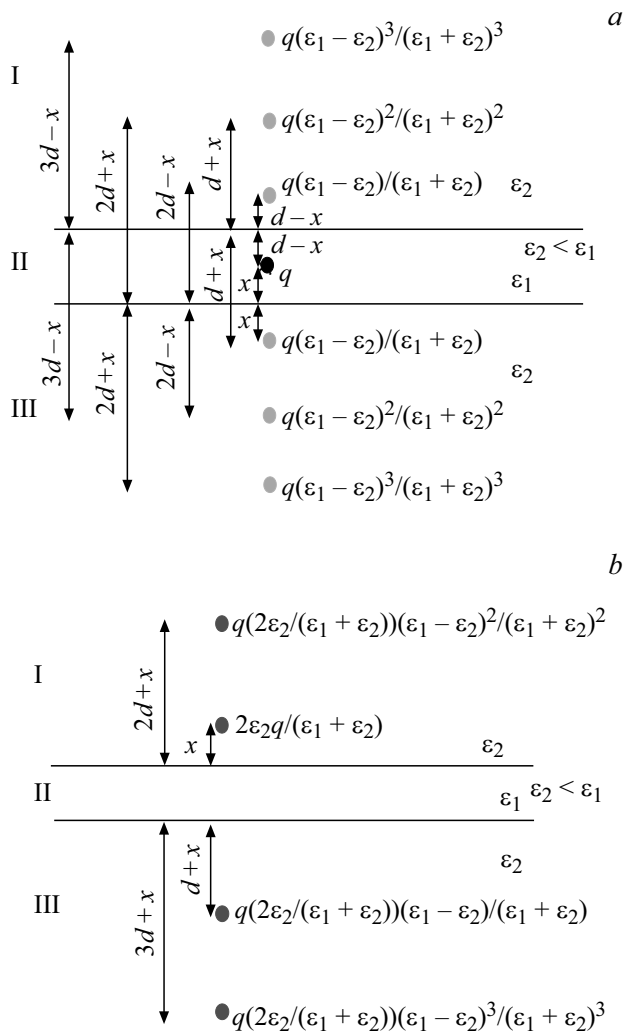


Рис. 2. Схема, показывающая заряды, создающие электрическое поле в слое с диэлектрической проницаемостью ϵ_1 (в области II), разделяющем полубесконечные среды с диэлектрической проницаемостью ϵ_2 . *a* — внешний заряд находится в разделяющем слое (в слое КЯ); *b* — внешний заряд помещен в окружающие слои (в слои барьеров). Серым показаны заряды-изображения, черным — внешний заряд, темно-серым — эффективные заряды на рис. 2, *b*. *d* — ширина КЯ (слоя с диэлектрической проницаемостью ϵ_1), *x* — расстояние от внешнего заряда до раздела сред.

При каждом шаге такие изображения удаляются от квантовой ямы на расстояние, равное ее ширине, и их заряд уменьшается в $(\epsilon_1 - \epsilon_2)/(\epsilon_1 + \epsilon_2)$ раз (см. рис. 2).

Как было отмечено выше, в гамильтониан для огибающих волновых функций был добавлен еще кулоновский потенциал описанных зарядов-изображений. Отметим, что при расчете состояний акцепторов последовательность зарядов-изображений (см. рис. 2) была оборвана. Заряды-изображения, удаленные от слоя КЯ на расстояние, значительно превышающее масштаб локализации волновой функции основного состояния акцепторного центра (30 Å [3]), не учитывались.

Уравнение для огибающих волновых функций дырок с потенциалом акцепторного иона и описанным выше потенциалом зарядов-изображений решали раскладывая волновую функцию акцепторного центра по базису из огибающих волновых функций свободных дырок в квантовой яме $v_n^s(\mathbf{k}, z)e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}}$, которые являются собственными функциями гамильтониана в отсутствие кулоновского потенциала:

$$F^s(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} C_n(\mathbf{k}) v_n^s(\mathbf{k}, z) e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}}, \quad (3)$$

где *n* — номер подзоны размерного квантования, \mathbf{r} — радиус-вектор, $\boldsymbol{\rho}$ — радиус-вектор в плоскости квантовой ямы, \mathbf{k} — волновой вектор дырки. В аксиальном приближении зависимость коэффициентов разложения $C_n(\mathbf{k})$ от направления волнового вектора, характеризуемого углом α , имеет вид

$$C_J(\mathbf{k}, n, s) = C_J(k, n, s) \exp\left[i\alpha\left(J - \frac{3}{2}\right)\right]. \quad (4)$$

Подставляя разложение (3) в уравнение эффективной массы, получаем интегральное уравнение для коэффициентов разложения. Далее интеграл может быть заменен дискретной суммой по *k*; при этом шаг по *k* необходимо выбирать меньше обратного борновского радиуса, чтобы подынтегральная функция мало менялась на одном шаге. Суммирование может быть оборвано при *k*, много больших обратного борновского радиуса. Таким образом, задача сводится к диагонализации конечномерной эрмитовой матрицы.

Так были рассчитаны одночастичные состояния дырок на акцепторных центрах и найдены энергии отрыва второй дырки от двойного (двухзарядного) акцептора, т.е. определена энергия связи A^{-1} -центра.

Для определения энергии ионизации A^0 -центра необходимо найти энергию состояния двух дырок на вакансии ртути, в котором обе частицы находятся на нижнем энергетическом уровне. Для такого расчета был использован метод самосогласованного поля Хартри [10]. Рассматривалось состояние частицы в поле примесного центра и другой частицы, при этом решались одночастичные уравнение Шредингера для каждой из двух дырок:

$$\begin{aligned} & \left[H_L(\nabla_1) + V(z_1) \right. \\ & \left. - \left(E + U(r_1) - \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{|\Psi_2(r_2)|^2 d^3 r_2}{|r_1 - r_2|} \right) \right] \Psi_1(r_1) = 0, \\ & \left[H_L(\nabla_2) + V(z_2) \right. \\ & \left. - \left(E + U(r_2) - \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{|\Psi_1(r_1)|^2 d^3 r_1}{|r_1 - r_2|} \right) \right] \Psi_2(r_2) = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где *E* — энергия дырок, $\Psi_{1,2}(r_{1,2})$ — волновые функции первой и второй дырок соответственно, $H_L(\nabla_{1,2})$ —

гамильтониан Латтинжера соответственно для первой и второй дырок, являющийся матрицей 4×4 , $V(z_{1,2})$ — ограничивающий потенциал квантовой ямы для первой и второй дырок соответственно. $U(r_{1,2})$ — суммарная потенциальная энергия первой и второй дырок соответственно в поле иона акцептора, зарядов-изображений и потенциала центральной ячейки. Представляя каждую волновую функцию в виде разложения (3) и подставляя эти разложения в систему (5), получим интегральные уравнения для коэффициентов разложения, которые решали методом последовательных приближений, описанным подробно в работе [6].

3. Результаты и обсуждение

На рис. 3 представлены рассчитанные зависимости энергии ионизации нейтральной и однократно ионизованной вакансии ртути (A^0 - и A^{-1} -центры соответственно) от положения такой вакансии в гетероструктуре $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ с КЯ шириной 48 Å. Черные линии показывают энергии связи нейтральной вакансии, рассчитанные как без учета влияния наведенных на гетерогранице зарядов (пунктирная линия), так и с учетом влияния зарядов-изображений. Серая линия на рис. 3 показывает энергию связи A^{-1} центра, рассчитанную с учетом влияния разности диэлектрических проницаемостей ямы и барьеров. Видно, что наведенные заряды сильно увеличивают энергию связи акцепторного

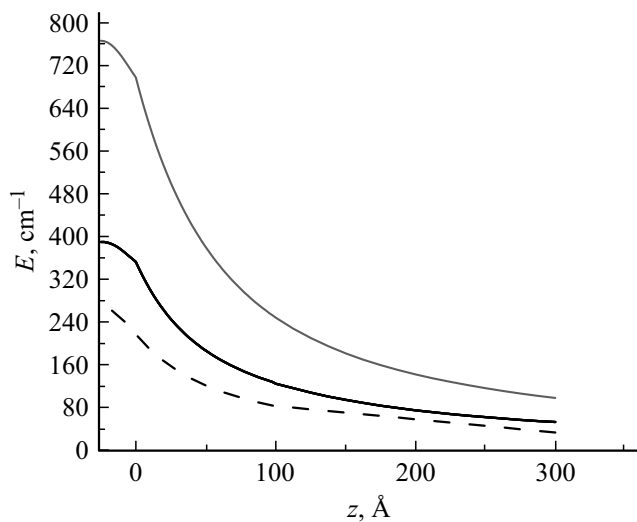


Рис. 3. Рассчитанные зависимости энергии ионизации нейтральной и однократно ионизованной вакансии ртути (A^0 - и A^{-1} -центры соответственно) от положения такой вакансии в гетероструктуре $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ с КЯ шириной 48 Å. Черные линии показывают энергии связи нейтральной вакансии, рассчитанные как без учета влияния наведенных на гетерогранице зарядов (пунктирная линия), так и с учетом влияния зарядов-изображений (сплошная линия). Серая линия показывает энергию связи A^{-1} -центра, рассчитанную с учетом влияния разности диэлектрических проницаемостей ямы и барьеров. За начало отсчета ($z = 0$) выбрана гетерограница.

центра, расположенного в КЯ или в барьере недалеко от гетерограницы, при этом энергия связи вакансии ртути, помещенной в глубине барьера, меняется меньше.

Из рис. 3 видно, что при смещении акцептора от центра квантовой ямы ($z = -25$ Å на графике) к гетерогранице и далее в глубину барьера ($z = 300$ Å на графике — соответствует толщине барьера [7]) энергия ионизации падает, так энергия связи нейтральной вакансии ртути A^0 -центра меняется от 400 до 50 см^{-1} , а энергия отрыва второй дырки от A^{-1} -центра уменьшается от 760 до 100 см^{-1} . Следует отметить, что при перемещении дефекта в барьер энергия связи дырки на таком центре не обращается в 0, так как вакансия в барьере создает притягивающий потенциал в КЯ, что приводит к появлению локализованных состояний двумерных дырок в таком потенциале, подобно тому, как описано в работе [11].

При равномерном распределении дефектов по структуре основной вклад в ФЛ будут образовывать оптические переходы с участием состояний центров, расположение которых соответствует участкам плавной зависимости энергии связи от положения акцепторного иона [11,12]. Такой участок плавной зависимости энергии ионизации акцепторных центров соответствует дефекту, помещенному в глубину барьера (участок на рис. 3 от $z = 100$ до 300 Å). Энергия связи вакансии ртути при этом положении акцептора очень медленно меняется от 130 до 48 см^{-1} для A^0 -центра и от 250 до 100 см^{-1} для A^{-1} центра. Отметим, что таким энергиям квантов соответствует длинноволновая полоса в спектре ФЛ гетероструктуры $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ с КЯ шириной 48 Å, исследованной в работе [6].

4. Заключение

Проведен расчет состояний вакансий ртути в гетероструктурах $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ с квантовыми ямами, учитывающий существенную разницу значений диэлектрической проницаемости слоев барьеров и квантовых ям. Результаты расчета показали существенное изменение энергии связи акцепторных центров — вакансий ртути из-за наведенного заряда. Так, наведенные заряды сильно увеличивают энергию связи акцепторного центра, расположенного в КЯ или в барьере недалеко от гетерограницы. Энергия связи вакансии ртути, помещенной в глубину барьера, меняется меньше. Рассчитанные энергии ионизации вакансий ртути хорошо согласуются с положением спектральных особенностей в спектре фотолуминесценции гетероструктур $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ с квантовыми ямами.

Финансирование работы

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

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] I.V. Altukhov, E.G. Chirkova, V.P. Sinis, M.S. Kagan, Yu.P. Gousev, S.G. Thomas, K.L. Wang, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich. *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 3909 (2001).
- [2] M.S. Kagan, I.V. Altukhov, V.P. Sinis, S.G. Thomas, K.L. Wang, K.L. Chao, I.N. Yassievich. *Thin Sol. Films*, **380**, 237 (2000).
- [3] А.В. Андрианов, А.О. Захарин, Ю.Л. Иванов, М.С. Кипа. *Письма ЖЭТФ*, **91**, 102 (2010).
- [4] S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, E.E. Orlova, R.Kh. Zhukavin, H. Riemann, H. Nakata, V.N. Shastin. *Phys. Status Solidi B*, **235**, 126 (2003).
- [5] V.V. Rumyantsev, D.V. Kozlov, S.V. Morozov, M.A. Fadeev, A.M. Kadykov, F. Terpe, V.S. Varavin, M.V. Yakushev, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, V.I. Gavrilenko. *Semicond. Sci. Technol.*, **32**, 095007 (2017).
- [6] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, М.С. Жолудев, В.С. Варавин, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, Ф. Терпе. *ЖЭТФ*, **154**, 1226 (2018).
- [7] 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. Терпе. *ФТП*, **50**, 1690 (2016).
- [8] S. Fraizzoli, A. Pasquarello. *Phys. Rev. B*, **42**, 5349 (1990).
- [9] E.G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C.R. Becker, G. Landwehr. *Phys. Rev. B*, **72**, 035321 (2005).
- [10] Г. Бете, Э. Солпите. *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М., Физматлит, 1960).
- [11] В.Я. Алешкин, Б.А. Андреев, В.И. Гавриленко, И.В. Ерофеева, Д.В. Козлов, О.А. Кузнецов. *ФТП*, **34**, 582 (2000).
- [12] V. Ya. Aleshkin, B. A. Andreev, V. I. Gavrilenko, I. V. Erofeeva, D. V. Kozlov, O. A. Kuznetsov. *Nanotechnology*, **11**, 348 (2000).

Редактор А.Н. Смирнов

Spectra of double acceptors in barriers and quantum wells layers of the HgTe/CdHgTe heterostructures

D.V. Kozlov^{1,2}, V.V. Rumyantsev^{1,2}, S.V. Morozov^{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

Abstract In this paper a theoretical study of the states of double acceptors in HgTe/CdHgTe heterostructures with quantum wells, taking into account the significant difference in the values of the dielectric constant of barrier layers and quantum wells was carried out. The effect of such a difference and the charge induced at the heterointerfaces arising from it was described using the potential of charge-images. The calculation showed a significant change in the binding energy of the acceptor centers — mercury vacancies due to the induced charge, and the ionization energies of mercury vacancies are in good agreement with the position of the spectral features in the photoluminescence spectrum of HgTe/CdHgTe heterostructures with quantum wells.