Многофононный захват электронов на состояния вакансий ртути в „широкозонных“ слоях HgCdTe

© Н.А. Бекин, Д.В. Козлов

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

E-mail: nbekin@ipmras.ru

Поступила в Редакцию 27 октября 2025 г.
В окончательной редакции 12 ноября 2025 г.
Принята к публикации 12 ноября 2025 г.

Используя адиабатическое приближение, сделана оценка коэффициента захвата электронов зоны проводимости на уровни A_2^{-2} вакансий ртути в полупроводниках HgCdTe с шириной запрещенной зоны более ~ 100 мэВ (с долей Cd в растворе $x > 0.2$). Показано, что захват электронов на вакансии существенно подавляется с ростом доли кадмия. Например, низкотемпературный коэффициент захвата уменьшается с $\sim 10^{-8}$ см$^3 \cdot$ с$^{-1}$ при $x = 0.21$ до $\sim 10^{-12}$ см$^3 \cdot$ с$^{-1}$ при $x = 0.25$. Низкий темп захвата электронов в широкозонных слоях HgCdTe обусловлен главным образом значительной удаленностью уровней вакансии ртути от дна зоны проводимости, а также умеренно слабой электрон-фононной связью локализованных на вакансиях электронов (фактор Хуанга–Рис $S < 0.5$).

Ключевые слова: глубокие дефекты, вакансии ртути, HgCdTe, многофононный захват электронов, адиабатическое приближение.

DOI: 10.61011/FTP.2025.08.62187.8701

1. Введение

Твердые растворы кадмий–ртуть–теллур (КРТ) привлекателены с точки зрения приложений и исследований ряда специфических фундаментальных эффектов [1–4], применения в инфракрасном детектировании [5] и лазерной генерации [6,7]. В зависимости от содержания кадмия в растворе $Hg_{1-x}Cd_xTe$ его ширина запрещенной зоны изменяется от нуля до 1.6 эВ в CdTe (при низких температурах). Важной характеристикой полупроводников КРТ для их приложений в оптоэлектронике является время жизни носителей заряда в зонах по отношению к безызлучательным переходам на уровни дефектов в запрещенной зоне или при межзонной рекомбинации. Захват электронов на дефекты интересен и сам по себе, и как этап в процессе рекомбинации Шокли–Рида–Холла (ШРХ) [8,9]. В данной работе теоретически анализируется захват электронов на вакансии ртути — дефекты, которые практически неизбежно появляются в растворах КРТ из-за слабой связи Hg−Te.

Вакансии ртути являются двухзарядными акцепторами, которые могут находиться в трех зарядовых состояниях: A_2^{-2}-центр (с акцептором не связана ни одна дырка), A_2^{-1}-центр (связана одна дырка) и A_2^0-центр (связаны две дырки). В узкозонных слоях КРТ захват электронов и дырок на вакансии исследовался для случая, когда он происходит при испускании единичных оптических фононов [10]. В более широкозонных материалах этот процесс рассматривался в квазиклассическом варианте адиабатического приближения [11], который справедлив для достаточно высоких температур. Показано, что для „узкозонных“ слоев КРТ ($x < 0.2$) межзонная безызлучательная рекомбинация через вакансии ртути может доминировать над оже-процессами при умеренных концентрациях электронов. В данной работе мы исследуем захват электронов на вакансии в „широкозонных“ слоях КРТ ($x > 0.2$) и используем квантовый подход Борна–Оппенгеймера [12], который применим для произвольных температур. Мы ограничились рассмотрением захвата на A_2^{-1}-центры, уровни которых в большей степени приближены к зоне проводимости [13], и поэтому захват на них электронов зоны проводимости, как ожидается, более быстрый.

В расчетах использовались модельные двухкомпонентные волновые функции, параметры которых выбирались с учетом решения уравнения Шредингера с гамильтонианом Кейна 6×6 с включением в рассмотрение зоны проводимости, зон тяжелых и легких дырок. Одна из компонент модельной функции отвечает зоне проводимости, вторая — валентной зоне, а ее параметры характеризуют вклад зоны проводимости и валентной зоны в кейновскую волновую функцию и учитывают различие масштабов локализации компонент, отвечающих этим зонам. Вибронные эффекты, обусловленные вырождением уровня вакансии [14], игнорировались, и, таким образом, динамика электронно-колебательного движения описывалась факторизованной волновой функцией адиабатического приближения, как для синглетных уровней. Так как радиус локализации волновой функции электрона на вакансии более чем в 2 раза превышает постоянную решетки раствора, мы учитывали взаимодействие электронов только с объемными фононными модами. Включались в рассмотрение только оптические фононы, и использовалась модель бездисперсных фононов [15].

Уровни вакансий в значительной степени привязаны к потолку валентной зоны и, таким образом, удалены от дна зоны проводимости в широкозонных слоях. Кроме того, вклад зоны проводимости в волновую функцию вакансии экспоненциально быстро убывает с ростом доли кадмия в слоях КРТ. Эти два обстоятельства являются главными причинами резкого убывания скорости захвата электронов на вакансии ртути с ростом содержания кадмия в растворе. В статье обсуждаются количественные расхождения с результатами полуклассических расчетов [11], которые обусловлены использованием авторами [11] приближений вне температурного интервала их применимости. Тем не менее в настоящей работе подтверждается и даже усиливается вывод о том, что в широкозонных слоях КРТ существенную роль в безызлучательной рекомбинации ШРХ должны играть более глубокие по сравнению с вакансиями ртути дефекты.

2. Метод расчета

2.1. Энергия и волновые функции адиабатического приближения

Электрон, связанный на дефекте и взаимодействующий с колебаниями решетки, можно описать волновой функцией адиабатического приближения $\Psi(\mathbf{r},\eta) = \psi(\mathbf{r},\eta)\chi(\eta)$, которая подчиняется системе уравнений Борна–Оппенгеймера [12], где $\psi(\mathbf{r},\eta)$ и $\chi(\eta)$ — волновые функции электрона и фононов соответственно; $\mathbf{r}$ — радиус-вектор электрона, η — совокупность нормальных координат колебательного движения кристалла.

Для умеренно глубоких дефектов энергия электрон-фононного взаимодействия хорошо аппроксимируется линейным по нормальным координатам η (или операторам рождения и уничтожения фононов) выражением:

$$H_{eL} = \Sigma_{\sigma,\lambda,\mathbf{q}} u_{\sigma\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r})\eta_{\sigma\lambda\mathbf{q}}, \tag{1}$$

где σ нумерует ветви закона дисперсии, λ — тип стоячей волны колебаний кристалла (cos- или sin-тип), $\mathbf{q}$ — волновой вектор фонона; $\eta_{\sigma\lambda\mathbf{q}}$ — вещественные нормальные координаты, измеряемые в единицах $[\hbar/(M\omega_{\sigma\mathbf{q}})]^{1/2}$, $\omega_{\sigma\mathbf{q}}$ — частота фонона, M — масса решеточного осциллятора. Суммирование по $\mathbf{q}$ здесь и далее ведется по половине зоны Бриллюэна. В работе [16] приведены оценки для четырех типов электрон-фононного взаимодействия в полярных полупроводниках, т. е. для деформационно-акустического (DA), деформационно-оптического (DO), пьезоакустического (PA) и полярного оптического (PO) взаимодействий. Показано, что по порядку величины интенсивности этих четырех типов взаимодействий (DA, DO, PA и PO) соотносятся как $(qa_0)^2 : qa_0 : qa_0 : 1$, где q — модуль волнового вектора фонона, а a_0 — постоянная решетки. Так как для волновых векторов с модулем, меньшим размеров зоны Бриллюэна, величина qa_0 является малым параметром, можно считать, что доминирующим механизмом электрон-фононного взаимодействия в полярных полупроводниках является электростатическое макрополе [16] (взаимодействие Фрёлиха). Мы экстраполируем выражения для энергии взаимодействия на всю зону Бриллюэна, включая коротковолновые фононы, для которых приближение макрополя, строго говоря, не применимо. Однако, учитывая сравнительно большой масштаб локализации волновой функции вакансий, это является хорошим приближением. Кроме того, учтем взаимодействие только с LO-фононами, и будем опускать далее индекс σ, нумерующий ветви закона дисперсии.

Опираясь на выражения из работы [16] и используя линейное преобразование операторов рождения и уничтожения фононов (см. *Приложение* в статье [17]), можно получить следующие выражения для функций $u_{\lambda\mathbf{q}}$:

$$u_{\lambda\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\hbar}{NM\omega_{\mathbf{q}}}\right)^{1/2} \frac{4\pi\gamma e}{q}\, c_\lambda(\mathbf{qr}), \tag{2}$$

$$\gamma = (4\pi\varepsilon)^{-1/2}(M/a_0^3)^{1/2}\omega_{\mathrm{LO}},$$

$$\varepsilon^{-1} = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1},$$

где ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, ε_∞ — диэлектрическая проницаемость на частоте, много большей инфракрасных частот (порядка ω_{LO}) и много меньшей оптических частот (порядка ширины запрещенной зоны); N — число элементарных ячеек в кристалле; a_0 — постоянная решетки; $c_1(\mathbf{qr}) = -\sin(\mathbf{qr})$, $c_2(\mathbf{qr}) = \cos(\mathbf{qr})$.

Уравнения Борна–Оппенгеймера легко решаются в первом порядке теории возмущений по оператору H_{eL}. Вероятность безызлучательных переходов электрона между уровнями дефекта можно выразить через матричные элементы этого оператора на волновых функциях электрона нулевого приближения $\psi^{(0)}(\mathbf{r})$ [15]. Она удовлетворяет уравнению Шредингера с гамильтонианом, в который включена только энергия взаимодействия электрона с дефектом $V_d(\mathbf{r})$:

$$(K + V_d)\psi^{(0)} = W^{(0)}\psi^{(0)}, \tag{3}$$

где K — оператор кинетической энергии.

Полная энергия электронно-колебательной системы, соответствующая электрону, находящемуся в состоянии дефекта с волновой функцией $\psi_j^{(0)}$ и с энергией $W_j^{(0)}$ [15]:

$$E_{j\{n\}} = W_j^{(0)} + D_j + \Sigma_{\lambda\mathbf{q}}\hbar\omega_{\mathbf{q}}(n_{\lambda\mathbf{q}} + 1/2), \tag{4}$$

где $\{n\}$ — совокупность чисел заполнения $n_{\lambda\mathbf{q}}$ фононных мод $(\lambda, \mathbf{q})$, D_j — энергия деформации:

$$D_j = -\frac{1}{2}\Sigma_{\lambda,\mathbf{q}}\hbar\omega_{\mathbf{q}}\left(\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(j)}\right)^2, \tag{5}$$

где $\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(j)}$ — смещение положения равновесия решеточного осциллятора:

$$\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(j)} = -\frac{\langle\psi_j^{(0)}|u_{\lambda\mathbf{q}}|\psi_j^{(0)}\rangle}{\hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}}}. \quad (6)$$

Для состояний континуума смещения $\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(j)}$ можно положить равными нулю. Волновые функции электронов зоны проводимости аппроксимировались плоскими волнами, а для локализованных состояний вакансий использовались приближенные модельные волновые функции.

2.2. Модельные волновые функции вакансии

Уравнение нулевого приближения (3) решалось в модели Кейна 6×6, детали метода описаны в работе [18]. В рассмотрение были включены зона проводимости, зоны легких и тяжелых дырок. При вычислении вероятности многофононных безызлучательных переходов мы использовали упрощенную модельную волновую функцию, параметры которой подбирались с учетом найденной кейновской волновой функции. А именно использовалась двухкомпонентная волновая функция, в которой первая строка в столбце отвечает зоне проводимости, а вторая — валентной зоне. Волновая функция состояния с волновым вектором $\mathbf{k}$ в зоне проводимости:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} V^{-1/2}\exp(\mathbf{kr}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где V — основной объем кристалла. Волновая функция состояния A_2^{-2}:

$$\psi_1(r) = \begin{pmatrix} \alpha\chi_{1s}(a_c, r) \\ \beta\chi_{1s}(a_v, r) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где $\chi_{1s}(a, r)$ — нормированная на единицу водородоподобная волновая функция $1s$-состояния, соответствующая радиусу Бора a ($a = a_c$ для зоны проводимости и $a = a_v$ для валентной зоны); α^2 — доля зоны проводимости в волновой функции, $\alpha^2 + \beta^2 = 1$.

Параметры a_c, a_v и α вычислялись следующим образом. Доля зоны проводимости представляет собой „проекцию“ кейновской волновой функции $\psi^{(0)}$ на зону проводимости:

$$\alpha^2 = \langle\psi^{(0)}|J_c|\psi^{(0)}\rangle, \quad (9)$$

где J_c — матрица 6×6, в которой отличны от нуля и равны единице только диагональные матричные элементы в двух строках, соответствующих зоне проводимости в шестикомпонентном столбце $\psi^{(0)}$; $\langle\psi^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle = 1$.

$$a_c = \frac{\langle\psi^{(0)}|rJ_c|\psi^{(0)}\rangle}{\langle\psi^{(0)}|J_c|\psi^{(0)}\rangle}, \quad (10)$$

$$a_v = \frac{\langle\psi^{(0)}|r(I - J_c)|\psi^{(0)}\rangle}{\langle\psi^{(0)}|I - J_c|\psi^{(0)}\rangle}, \quad (11)$$

где I — единичная матрица 6×6.

2.3. Вероятность многофононных переходов и коэффициент захвата

Приведем выражение для вероятности безызлучательных переходов [15] в наших обозначениях, считая, что начальное состояние электрона в зоне проводимости соответствует волновому вектору $\mathbf{k}$. Полагая частоту фонона ω независящей от волнового вектора, имеем

$$w(\mathbf{k}) = \Omega_0\Sigma_{m=-2}^{2}\left(\frac{n+1}{n}\right)^{(p-m)/2} g_m(\mathbf{k})I_{p-m}(z), \quad (12)$$

$$\Omega_0 = \omega\,\frac{\pi}{(\hbar\omega)^2}\,e^{-S(2n+1)}, \quad (13)$$

где n — среднее число заполнения фононных мод (фактор Бозе–Энштейна), S — фактор Хуанга–Рис:

$$S = \Sigma_{\lambda\mathbf{q}}S_{\lambda\mathbf{q}},$$

$$S_{\lambda\mathbf{q}} = \frac{1}{2}\left(\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(\mathbf{k})} - \eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(1)}\right)^2 \approx \frac{1}{2}\left(\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(1)}\right)^2, \quad (14)$$

где $\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(1)}$ и $\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(\mathbf{k})}$ — смещения центров равновесия (6) решеточных осцилляторов, соответственно, для состояния A_2^{-2} и континуума зоны проводимости. Если объем $V \to \infty$, то смещения $\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(\mathbf{k})}$ являются бесконечно малыми, более высокого порядка по сравнению с $\eta_{\lambda\mathbf{q}}^{(1)}$, и ими можно пренебречь. В частности, энергия деформации (5) $D_{\mathbf{k}}$ для состояния электрона с волновым вектором $\mathbf{k}$ в континууме равна нулю при $V \to \infty$ ($N \to \infty$) в отличие от энергии деформации для локализованного состояния, которая является конечной при указанном предельном переходе.

Другие обозначения в формуле (12):

$$p = p(\mathbf{k}) = \frac{E_T(\mathbf{k})}{\hbar\omega}, \quad (15)$$

где E_T — энергия перехода (разность энергий (4) вовлеченных в переход состояний при фиксированных числах заполнения фононов):

$$E_T(\mathbf{k}) = W_{\mathbf{k}}^{(0)} - W_1^{(0)} - D_1. \quad (16)$$

Здесь $W_{\mathbf{k}}^{(0)} = E_c + \hbar^2k^2/(2m_c)$ — энергия электрона в зоне проводимости, E_c — энергия дна зоны проводимости, m_c — эффективная масса электрона, $W_1^{(0)}$ — энергия электрона в состоянии A_2^{-2} вакансии, D_1 — энергия деформации, соответствующая этому состоянию. Энергия $W_1^{(0)}$ вычислялась в модели Кейна с учетом химического сдвига. Химический сдвиг рассчитывался с помощью модельного потенциала центральной ячейки, который выбирался так же, как в работе [19], в виде экранированного потенциала точечного заряда, с диэлектрической проницаемостью и длиной экранировки в качестве подгоночных параметров. Эти параметры подбирали, добиваясь соответствия между расчетными

значениями энергии связи вакансии и данными по красной границе фотоэффекта, полученными из спектров фототока. В подгоночной процедуре влияние энергии деформации не учитывалось, предполагая, что $D_1 = 0$. Далее,

$$z = 2S\big(n(n+1)\big)^{1/2}, \tag{17}$$

$I_p(z)$ — модифицированная функция Бесселя.

Обозначения для g_m приведем с учетом равенств $\eta^{(\mathbf{k})}_{\lambda\mathbf{q}} = 0$:

$$g_0(\mathbf{k}) = 2^{-1}\big(1 - 2n(n+1)\big)|V_\mathbf{k}\eta|^2,$$

$$g_1(\mathbf{k}) = (n+1)(|V_\mathbf{k}|^2 - |V_\mathbf{k}\eta|^2),$$

$$g_{-1}(\mathbf{k}) = n\big(|V_\mathbf{k}|^2 + |V_\mathbf{k}\eta|^2\big), \tag{18}$$

$$g_2(\mathbf{k}) = 2^{-1}(n+1)^2|V_\mathbf{k}\eta|^2,$$

$$g_{-2}(\mathbf{k}) = 2^{-1}n^2|V_\mathbf{k}\eta|^2,$$

$$|V_\mathbf{k}|^2 = \Sigma_{\lambda\mathbf{q}}|\langle\psi_1|u_{\lambda\mathbf{q}}|\psi_\mathbf{k}\rangle|^2, \tag{19}$$

$$|V_\mathbf{k}\eta|^2 = |\Sigma_{\lambda\mathbf{q}}\langle\psi_1|u_{\lambda\mathbf{q}}|\psi_\mathbf{k}\rangle\eta^{(1)}_{\lambda\mathbf{q}}|^2, \tag{20}$$

где для вычисления матричных элементов и смещений (6) использованы модельные волновые функции (7) и (8), соответственно, для континуума зоны проводимости и состояний A_2^{-2}. В этом приближении функции $g_m(\mathbf{k}) = g_m(k)$ зависят только от модуля вектора k.

Чтобы получить коэффициент захвата c, усредним вероятность перехода (12) по функции распределения электронов в зоне, полагая основной объем V в выражении (7) для волновой функции континуума равным единице:

$$c = \frac{\int w(\mathbf{k})f(\mathbf{k}, T_e)d\mathbf{k}}{\int f(\mathbf{k}, T_e)d\mathbf{k}}. \tag{21}$$

Температура электронов T_e предполагалась в общем случае отличной от температуры кристалла T. Функция распределения в расчетах полагалась больцмановской, что подразумевает достаточно малую концентрацию электронов и их ненулевую температуру.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Энергия и волновые функции

Для расчетов использовались параметры полупроводников КРТ (параметры гамильтониана Кейна, диэлектрическая проницаемость и ширина запрещенной зоны), известные из литературы [20,21]. На рис. 1 представлена зависимость энергии связи однократно ионизованной вакансии ртути (A_2^{-1}-центра) от доли кадмия в растворе. С учетом химического сдвига эта энергия приблизительно вдвое меньше, чем без его учета, и, кроме того, она слабее зависит от содержания кадмия. Расчеты в модели Кейна энергии связи и параметров модельной волновой функции (радиусов локализации и доли зоны проводимости в волновой функции) производились при

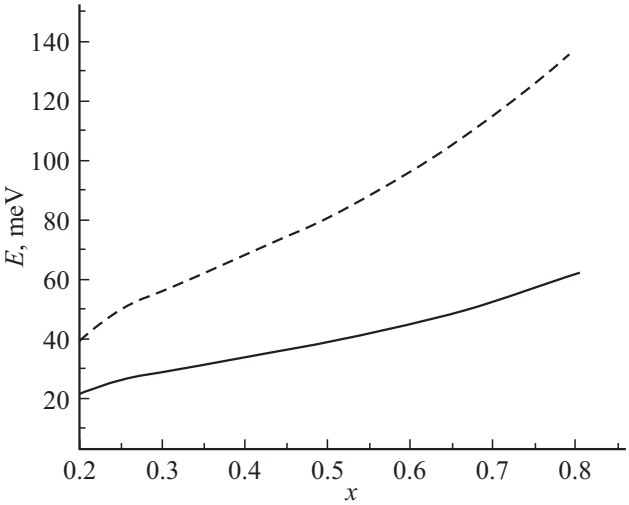

Рис. 1. Энергия связи однократно ионизованной вакансии ртути (A_2^{-1}-центра) в $Cd_xHg_{1-x}Te$ с учетом химического сдвига (сплошная линия) и без его учета (пунктирная линия).

температуре 77 К, и их температурной зависимостью пренебрегалось.

Параметры модельной волновой функции представлены на рис. 2. На рис. 2, *a* показаны радиусы локализации (10) и (11), соответствующие зоне проводимости и валентной зоне. Заметим, что они сопоставимы друг с другом по величине во всем интервале x, несмотря на значительное удаление зоны проводимости от уровня вакансии в сравнении с валентной зоной. Несмотря на то что в кейновскую волновую функцию вакансии имеются вклады с существенно разным масштабом локализации, средние характерные масштабы, определяемые указанными формулами усреднения, оказываются сопоставимыми в результате смешивания компонент волновой функции потенциалом дефекта. При этом сильно локализованные вклады не отражаются существенным образом на средних радиусах a_c и a_v.

Доля зоны проводимости в волновой функции в зависимости от содержания кадмия в растворе представлена на рис. 2, *b*. С хорошей точностью эту величину можно аппроксимировать следующим выражением:

$$\alpha^2 = b + A\exp(-x/x_s), \tag{22}$$

$$b = 1.84 \cdot 10^{-3}, \quad A = 1.42 \cdot 10^{-2}, \quad x_s = 0.315.$$

Фактор Хуанга–Рис S представлен на рис. 3. При его вычислении с помощью модельной волновой функции (8) вкладом зоны проводимости пренебрегалось, так как $\alpha \ll 1$. При любом содержании кадмия фактор Хуанга–Рис более чем в 2 раза меньше единицы, что соответствует слабой электрон-фононной связи. Это обусловлено прежде всего довольно большим радиусом локализации волновой функции вакансии в сравнении с постоянной решетки a_0. Для справки приведем простую аналитическую оценку для S, которая представляет

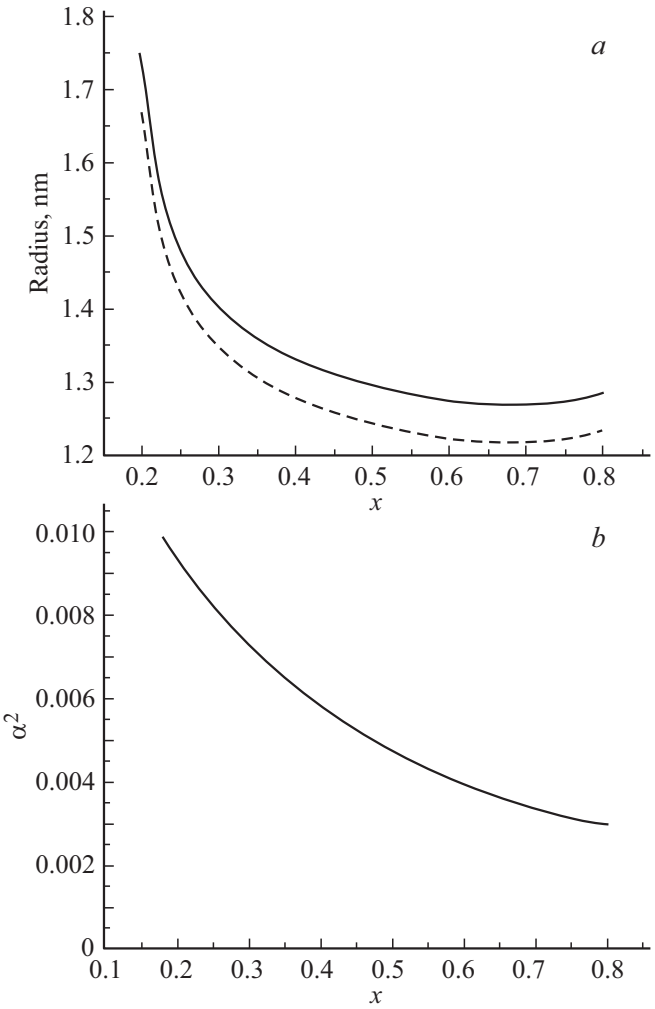

Рис. 2. Параметры модельной волновой функции однократно ионизованной вакансии ртути (A_2^{-1}-центра) в $Cd_xHg_{1-x}Te$: *a* — радиусы локализации волновой функции для компоненты, соответствующей валентной зоне (пунктирная линия) и зоне проводимости (сплошная линия); *b* — доля зоны проводимости α^2 в волновой функции.

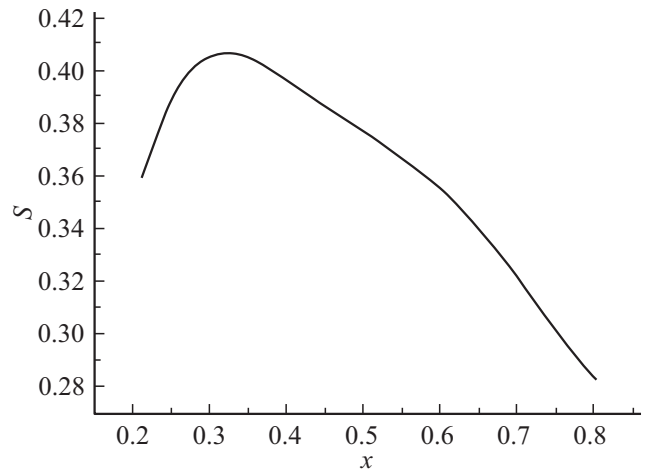

Рис. 3. Фактор Хуанга–Рис для перехода электрона из зоны проводимости на основное состояние A_2^{-1}-центра в $Cd_xHg_{1-x}Te$.

собой главный член асимптотического разложения при $a_0/a_v \ll 1$:

$$S \approx \frac{5\pi\gamma^2 e^2 a_0^3}{16M\hbar\omega^3 a_v}.$$

Расчеты в модели Кейна с учетом химического сдвига дают близкие к представленным на рис. 3 результаты. Например, при $x = 0.21$ $S \approx 0.34$, при $x = 0.25$ $S \approx 0.37$.

3.2. Коэффициент захвата

Температурная зависимость коэффициента захвата на центр A_2^{-1} представлена на рис. 4. В первую очередь отметим, что коэффициент захвата резко зависит от содержания кадмия в растворе: при увеличении x с 0.21 до 0.25 он уменьшается на несколько порядков. Это обусловлено увеличением ширины запрещенной зоны и энергии перехода с ростом доли кадмия. Значительная резкость зависимости коэффициента захвата от энергии перехода является следствием слабой электрон-фононной связи ($S \ll 1$). В этом случае при низких температурах появляется сильный дополнительный фактор, уменьшающий темп захвата с ростом энергии перехода, так как вероятность перехода пропорциональна отношению $S^p/\Gamma(p)$ [15] ($\Gamma(p)$ — гамма-функция), p — энергия перехода, выраженная в числе квантов фононов (15). (Для справки, энергия LO-фонона при комнатной температуре составляет 20.7 мэВ в CdTe и 16.7 мэВ в HgTe [20].) При этом в „широкозонных“ КРТ режим низких температур,

$$z \ll p, \tag{23}$$

z определяется формулой (17), сохраняется вплоть до комнатной температуры.

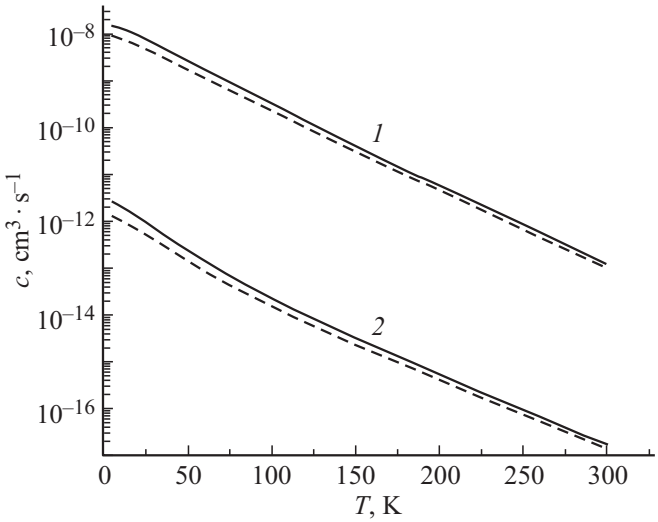

Рис. 4. Коэффициент захвата электронов зоны проводимости на вакансии ртути (A_2^{-1}-центры) в растворе $Cd_xHg_{1-x}Te$ с содержанием кадмия $x = 0.21$ (кривые *1*) и $x = 0.25$ (кривые *2*). Сплошными линиями показаны температурные зависимости, когда электронная температура T_e совпадает с температурой решетки T, пунктиром — когда $T_e = T + 50$ K.

Далее, отметим убывающий характер температурной зависимости коэффициента захвата, причем эта зависимость также является очень резкой. Характер этой зависимости объясняется одновременным действием двух факторов. С одной стороны, ширина запрещенной зоны в КРТ довольно быстро растет с температурой. С другой стороны, слабость электрон-фононной связи, в силу пропорциональности вероятности многоквантовых переходов фактору $S^p/\Gamma(p)$, приводит к очень резкому уменьшению коэффициента захвата с ростом энергии перехода при увеличении температуры. При этом эту тенденцию к подавлению захвата не может преодолеть температурная стимуляция захвата, пропорциональная фактору $(n+1)^p$ [15].

Приведенные рассуждения и выводы, вытекающие из характера зависимости вероятности захвата электронов от энергии перехода, сохраняют свою справедливость после усреднения этой вероятности по функции распределения (21) при вычислении коэффициента захвата. Сделаем аналитическую оценку коэффициента захвата, ограничившись существенно многоквантовыми переходами, $p \gg 1$ $(x > 0.2)$. Для модифицированных функций Бесселя $I_p(z)$ воспользуемся асимптотическим разложением для больших порядков, $p \gg z$ [22]. Произведем в формуле (21) усреднение по максвелловской функции распределения, вычисляя интеграл методом перевала, предполагая выполнение неравенства $p_0 = E_T(0)/(\hbar\omega) \gg 1$:

$$c \approx \Omega_0 \Sigma^2_{m=-2} (n+1)^{p_m+\gamma_m} w_m, \tag{24}$$

$$w_m = 4\left(\frac{\hbar\omega\gamma_m}{k_\mathrm{B}T_e}\right)^{3/2} \varphi_m B_m(z) \exp\left(-\frac{\hbar\omega\gamma_m}{k_\mathrm{B}T_e}\right), \tag{25}$$

$$B_m(z) = \frac{S^{p_m+\gamma_m}}{\Gamma(p_m+\gamma_m+1)} \left(1+\left(\frac{z}{p_m}\right)^2\right)^{-1/4} \exp\left(\frac{z^2}{4p_m}\right), \tag{26}$$

$$\gamma_m = \left[2\left(\ln\left(\frac{p_m}{(n+1)S}\right) + \frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T_e} + \left(\frac{z}{2p_m}\right)^2\right)\right]^{-1}, \tag{27}$$

$$p_m = p_0 - m,$$

$$\varphi_m = (n+1)^{-m} g_m(k_m), \tag{28}$$

$$k_m = \sqrt{2m_c\hbar\omega\gamma_m}/\hbar, \tag{29}$$

где m_c — эффективная масса в зоне проводимости. При выводе выражений использовалась формула Стирлинга для γ-функции $\Gamma(p)$ [22].

Функция $B_m(z)$ сильно зависит от индекса m, что приводит к существенному доминированию в сумме (24) слагаемого с $m = 2$ в широком температурном интервале. Для вычисления этого слагаемого положим в формуле (28) $k_m \approx 0$, что допустимо при $k_m a_v \ll 1$ и $k_m a_c \ll 1$, и в данном случае эти неравенства выполняются. Получим

$$\varphi_2 = \frac{8\pi^3\alpha^2 a_0^6 a_c (\gamma e)^4 (\lambda^2/4 + 3\lambda/2 + 1)^2}{M^2\omega^4(\lambda/2+1)^6}, \tag{30}$$

где $\lambda = a_v/a_c$. При вычислении φ_2 использовалось неравенство $\alpha \ll 1$. Тогда коэффициент захвата

$$c \approx \Omega_0 (n+1)^{p_2+\gamma_2} w_2, \tag{31}$$

где все входящие в эту формулу величины определяются соотношениями (13), (25)–(27), (30). Ценой незначительного ухудшения точности в этих формулах можно положить $p_2 + \gamma_2 \approx p_2$.

Наиболее сильную зависимость от энергии перехода дает множитель $B_m(z)$ (26), который пропорционален отношению $S^{p_0}/\Gamma(p_0)$, $p_0 = E_T(0)/(\hbar\omega)$. Для слабой и умеренно слабой электрон-фононной связи $(S < 1)$ числитель и знаменатель этого отношения влияют на захват одинаковым образом: тот и другой навязывают убывающую зависимость коэффициента захвата от p_0, причем эта зависимость особенно резкая при сильном неравенстве $S \ll 1$. Это и объясняет указанную сильную зависимость скорости захвата электронов от доли кадмия x и температуры T.

Сравним коэффициент захвата с полученными недавно результатами расчетов в полуклассическом приближении [11], ограничиваясь случаем „широкозонных“ КРТ $(x > 0.2)$. Во-первых, для фиксированной температуры расчеты в настоящей работе дают гораздо более существенную зависимость коэффициента захвата от содержания кадмия по сравнению с полуклассикой. Например, согласно работе [11], при температуре $T = 100$ K увеличение содержания кадмия x с 0.22 до 0.24 приводит к уменьшению коэффициента захвата с $\sim 8 \cdot 10^{-9}$ см$^3 \cdot$ с$^{-1}$ до $\sim 10^{-9}$ см$^3 \cdot$ с$^{-1}$. Напротив, расчеты данной работы при той же температуре на концах близкого интервала x от 0.21 до 0.25 дают коэффициент захвата $\sim 3 \cdot 10^{-10}$ см$^3 \cdot$ с$^{-1}$ и $\sim 2 \cdot 10^{-14}$ см$^3 \cdot$ с$^{-1}$ соответственно. А именно величина коэффициента захвата оказывается существенно более малой, а влияние состава раствора КРТ на захват электронов гораздо более существенным.

Во-вторых, настоящая работа дает гораздо более существенную температурную зависимость коэффициента захвата (в интервале температур от 60 до 100 K изменение на несколько порядков) по сравнению с расчетами [11] (в том же температурном интервале изменение не более нескольких десятков процентов, а при $x < 0.2$ не более чем в 3 раза).

Причина таких существенных расхождений состоит в том, что в полуклассических расчетах [11] использовались выкладки (см. работу [23]) для режима термоактивации в температурном интервале за пределами его применимости. Квантовый подход [15] дает точный критерий для режима термоактивации:

$$2S[n(n+1)]^{1/2} \gg p. \tag{32}$$

Для широкозонных полупроводников КРТ вплоть до комнатной температуры выполняется противоположный критерий (23) низких температур. Именно при низких температурах возникает чрезвычайно сильная зависимость скорости захвата от энергии перехода, которая в приближенных оценках описывается множителем

B_m (26), пропорциональным S^{p_0} и обратно пропорциональным гамма-функции $\Gamma(p_0)$.

Заметим, что с понижением доли кадмия неравенство (23) ослабляется или нарушается, поэтому расхождение между результатами данной работы и работы [11] существенно уменьшается. При снижении доли кадмия до $x = 0.177$, когда захват электронов из зоны проводимости становится возможным при испускании одиночных оптических фононов, полуклассические оценки коэффициента захвата [11] хорошо согласуются со строгими квантово-механическими расчетами для одноквантовых процессов захвата [10].

С учетом этого, опираясь на анализ экспериментальных данных по временной динамике фототока [11], мы можем заключить, что захват электронов на вакансии ртути как часть механизма рекомбинации Шокли–Рида–Холла может играть значимую роль в рекомбинации электронов в некотором узком интервале композиций при содержании кадмия при $x < 0.2$ вблизи $x = 0.2$. В этом случае для низких концентраций электронов рекомбинация ШРХ через вакансии ртути может играть значимую роль, конкурируя с оже-рекомбинацией. Напротив, в широкозонных КРТ ($x > 0.2$) рекомбинация ШРХ через вакансии ртути сильно подавлена, поэтому она происходит через более глубокие ловушки.

4. Заключение

Используя адиабатическое приближение, сделана оценка коэффициента захвата электронов зоны проводимости на вакансии ртути (акцепторные A_2^{-1}-центры) в „широкозонных“ ($x > 0.2$) полупроводниках $Cd_xHg_{1-x}Te$. Показано, что коэффициент захвата резко уменьшается с ростом доли кадмия x. Например, низкотемпературный коэффициент захвата уменьшается с $\sim 10^{-8}\,\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ при $x = 0.21$ до $\sim 10^{-12}\,\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ при $x = 0.25$. Существенное подавление многофононного захвата с ростом доли кадмия объясняется увеличением энергии перехода в сочетании со слабостью электрон-фононной связи для электронов, локализованных на вакансиях (фактор Хуанга–Рис $S < 0.5$), и значительным удалением уровней вакансий от дна зоны проводимости. Слабость электрон-фононной связи обусловлена главным образом сравнительно большим радиусом локализации электрона на вакансии. Это приводит к сильной локализации волновых функций вакансий в импульсном пространстве (характерной для дефектов с мелкими уровнями), что ограничивает число объемных фононных мод, с которыми эффективно взаимодействуют электроны при многоквантовых процессах.

В межзонной безызлучательной рекомбинации электронов в широкозонных слоях CdHgTe существенную роль играют более глубокие по сравнению с вакансиями ртути дефекты.

Финансирование работы

Расчеты энергий дырок на акцепторных центрах, масштабов локализации их волновых функций и долей зоны проводимости в этих функциях выполнены в рамках государственного задания ИПФ РАН, проект FFUF-2024-0019. Расчеты коэффициентов захвата электронов на акцепторные центры выполнены при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00298).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] M. Orlita, K. Masztalerz, C. Faugeras, M. Potemski, E.G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. Phys. Rev. B, **83**, 115307 (2011).
[2] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang. Science, **314**, 1757 (2006).
[3] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang. Science, **318**, 766 (2007).
[4] M. Orlita, D.M. Basko, M.S. Zholudev, F. Teppe, W. Knap, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretskii, P. Neugebauer, C. Faugeras, A.-L. Barra, G. Martinez, M. Potemski. Nature Physics, **10**, 233 (2014).
[5] A. Rogalski. Opto-Electron. Rev., **20**, 279 (2012).
[6] S.V. Morozov, V.V. Rumyantsev, M.A. Fadeev, M.S. Zholudev, K.E. Kudryavtsev, A.V. Antonov, A.M. Kadykov, A.A. Dubinov, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, V.I. Gavrilenko. Appl. Phys. Lett., **111**, 192101 (2017).
[7] K.E. Kudryavtsev, V.V. Rumyantsev, V.V. Utochkin, M.A. Fadeev, V.Ya. Aleshkin, A.A. Dubinov, M.S. Zholudev, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretskii, V.G. Remesnik, F. Teppe, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov. J. Appl. Phys., **130**, 214302 (2021).
[8] W. Shockley, W.T. Read, jr. Phys. Rev., **87**, 835 (1952).
[9] R.N. Hall. Phys. Rev., **87**, 387 (1952).
[10] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, А.А. Янцер, С.В. Морозов, В.И. Гавриленко. ЖЭТФ, **165** (6), 840 (2024).
[11] D.V. Kozlov, A.V. Ikonnikov, K.A. Mazhukina, S.V. Morozov, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, V.V. Rumyantsev. Semicond. Sci. Technol., **40**, 035007 (2025).
[12] В.А. Коварский, Н.Ф. Перельман, И.Ш. Авербух. *Многоквантовые процессы* (М., Энергоатомиздат, 1985).
[13] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, H.-W. Hübers, В.И. Гавриленко. ФТП, **52** (11), 1257 (2018).
[14] I.B. Bersuker. *The Jahn-Teller Effect* (Cambridge University Press, UK, 2006).
[15] E. Gutsche. Phys. Status Solidi B, **109**, 583 (1982).
[16] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984).
[17] Н.А. Бекин, Р.Х. Жукавин, В.В. Цыпленков, В.Н. Шастин. ФТП, **58**, 7 (2024).
[18] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, H.-W. Hübers, В.И. Гавриленко. ФТП, **52**, 1257 (2018).

[19] N.O. Lipari, A. Baldereschi, M.L.W. Thewalt. Solid State Commun., **33**, 277 (1980).
[20] S. Adachi. *Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors* (John Wiley & Sons, Ltd, 2005).
[21] J.P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, B. Toulouse, R. Legros, A. Lusson. J. Appl. Phys., **67**, 6454 (1990).
[22] *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, ed. by M. Abramowitz, I. Stegun. National Bureau of Standards Applied Mathematics Series 55, 1972.
[23] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Яссиевич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Изд-во „Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН“, 1997).

Редактор А.Н. Смирнов

Multiphonon electron capture on mercury vacancy states in „wide-band“ layers of HgCdTe

N.A. Bekin, D.V. Kozlov

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

Abstract Using the adiabatic approximation, the capture coefficient of conduction band electrons on A_2^{-2} mercury vacancy levels in HgCdTe semiconductors with a band gap of more than ~ 100 meV (with a Cd fraction in the solution $x > 0.2$) was estimated. It is shown that electron capture on the vacancies is significantly suppressed with an increase in the cadmium content. For example, the low-temperature capture coefficient decreases from $\sim 10^{-8}\,\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{c}^{-1}$ at $x = 0.21$ to $\sim 10^{-12}\,\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{c}^{-1}$ at $x = 0.25$. The low rate of electron capture in wide-band HgCdTe layers is mainly due to the significant distance of mercury vacancy levels from the bottom of the conduction band, as well as the moderately weak electron-phonon coupling of electrons localized in vacancies (Huang-Rhys factor $S < 0.5$).