

# Моделирование времен релаксации и энергетического спектра квантовой ямы $\text{CdTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$ при варьировании разрыва валентных зон, ширины ямы и состава $x$

© Е.А. Мележик<sup>†</sup>, Ж.В. Гуменюк-Сычевская, Ф.Ф. Сизов

Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева Национальной академии наук Украины, 03028 Киев, Украина

(Получена 4 марта 2010 г. Принята к печати 7 апреля 2010 г.)

Смоделированы зависимости времен релаксации и энергетического спектра квантовой ямы  $\text{CdTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$  от параметров такой квантовой ямы в интервале молярных долей кадмия ( $0 < x < 0.16$ ). Установлено, что изменение  $x$  от 0 до 0.16 приводит к изменению локализации волновых функций электронов в квантовой яме. Получен критерий для определения количества интерфейсных уровней локализованных электронов в зависимости от параметров квантовой ямы. Выявлен эффект резкого (на 2 порядка) возрастания времени релаксации локализованных электронов при малых ширинах квантовых ям и значениях  $x$ , близких к 0.16.

## 1. Введение

Терагерцовая область спектра в наше время вызывает повышенный интерес, поскольку она связана с физическими процессами в материалах, которые вызывают сильное поглощение излучения в этой области и поэтому служат своеобразной меткой материала. В последнее время терагерцовые (ТГц) системы находят применение не только в астрономии, но и в биологии, медицине, безопасности. Для использования в этих областях желательно иметь легкие, компактные, быстродействующие и чувствительные детекторные системы, не требующие глубокого охлаждения. Большинство существующих приемников ТГц излучения (сверхпроводниковые болометры на горячих носителях, структуры сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник и др.) в условиях земного фона обладают высокой чувствительностью (эквивалентная мощность шума  $\text{NEP} \approx 10^{-14} - 10^{-16}$  Вт/Гц<sup>1/2</sup>) и быстродействием ( $\tau \approx 10^{-9} - 10^{-11}$  с), но требуют глубокого охлаждения ( $T = 0.1 - 4$  К) [1].

Узкощелевые полупроводники типа твердых растворов  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  являются перспективными материалами для создания ТГц детекторов, поскольку имеют высокую подвижность носителей заряда даже при температурах  $T \geq 77$  К.

В работе [2] показана возможность детектирования ТГц излучения полупроводниковым приемником на основе кадмий–ртуть–теллур на квантовом эффекте Холла тоже при глубоком охлаждении. Известные полупроводниковые болометрические приемники на антимониде индия [3], имеющие высокую чувствительность ( $\text{NEP} \approx 10^{-17}$  Вт/Гц<sup>1/2</sup>) в диапазоне ( $\lambda \approx 0.3 - 4$  мм), также нуждаются в глубоком охлаждении и имеют большое время фотоответа ( $\tau \approx 10^{-6}$  с), что связано с сильным электрон–электронным взаимодействием. Существующие неохлаждаемые приемники ТГц излучения, как правило, ограничены по быстродействию временами

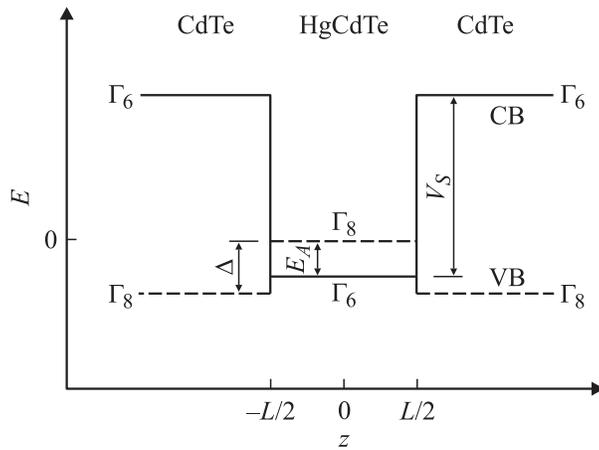
$\tau \geq 10$  мс (за исключением барьеров Шоттки и приемников излучения на полевых транзисторах [4]) и имеют  $\text{NEP} \approx 10^{-9} - 10^{-10}$  Вт/Гц<sup>1/2</sup>. В работе [5] была показана возможность увеличения отвода поглощенной энергии за счет подавления электрон–электронного взаимодействия в квантово–размерных слоях полупроводника с двумерным электронным газом.

Задачей данной работы было моделирование свойств квантовой ямы (КЯ)  $\text{CdTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$  с инвертированной зонной структурой ( $0 < x < 0.16$ ) с целью изучения возможности создания быстродействующего ТГц приемника, работающего при температурах не ниже температуры жидкого азота.

Особенностью данной структуры в интервале молярных долей кадмия  $0 < x < 0.16$  является то, что соединение  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  обладает инвертированной зонной структурой по сравнению с  $\text{CdTe}$ , т.е. в нем зона проводимости имеет симметрию  $\Gamma_6$ , а валентная зона — симметрию  $\Gamma_8$ . Увеличение состава  $x$  от 0 до 0.16 приводит к уменьшению ширины эффективной запрещенной зоны ямы и, следовательно, к уменьшению эффективной массы локализованных в ней носителей. Малая эффективная масса ведет к высокой подвижности носителей, что является важным фактором для достижения высокой чувствительности и большого быстродействия детекторов на основе рассматриваемых структур. В литературе известны расчеты зонного спектра и волновых функций сверхрешетки с инвертированной зонной структурой  $\text{CdTe}/\text{HgTe}/\text{CdTe}$  [6], однако для составов  $x > 0$  такие расчеты нам не известны. Кроме того, в литературе существуют различные данные для экспериментально определяемой величины разрыва валентных зон ямы и барьера  $\Delta$  (рис. 1): 40 [7,8], 63 [9], 350 [10–12], 550 мэВ [13–15], которые получаются при использовании различных измерительных методов.

В работе рассчитан энергетический спектр, волновые функции локализованных электронов в квантовой яме с инвертированной зонной структурой  $\text{CdTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$ , а также времена релаксации носителей на про-

<sup>†</sup> E-mail: emelezhik@gmail.com



**Рис. 1.** Зонная схема квантовой ямы CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe вдоль оси  $z$  ямы, где  $L$  — ширина квантовой ямы,  $\Delta$  — величина разрыва валентных зон,  $V_s$  — величина разрыва зон проводимости, а  $E_A$  — отрицательная ширина запрещенной зоны в яме.

дольных оптических фононах при различных молярных долях кадмия  $x$  ( $0 < x < 0.16$ ), величинах разрыва валентных зон  $\Delta$  и ширины ямы  $L$ . Работа построена следующим образом. В разд. 2 описана методика расчета спектров и волновых функций. В разд. 3 приведены результаты моделирования волновых функций локализованных электронов при различных составах  $x$ . В разд. 4 поданы энергетические спектры локализованных электронов в зависимости от ширины ямы  $L$ , а также проанализировано влияние величины разрыва валентных зон  $\Delta$  на изменение таких спектров. Получен критерий для определения количества интерфейсных энергетических уровней, расположенных ниже дна зоны проводимости ямы, в зависимости от  $L$ ,  $x$  и  $\Delta$ . В разд. 5 приведены зависимости энергетических спектров от состава  $x$ .

В разд. 6 приводятся результаты расчетов времен релаксации локализованных электронов на продольных оптических фононах. А также описывается эффект резкого увеличения таких времен релаксации при значениях состава  $x$ , близких к пороговому значению 0.16, при котором ширина запрещенной зоны рассматриваемого соединения  $E_g \approx 0$ .

## 2. Расчет энергетического спектра и волновых функций квантовой ямы CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe

Расчеты энергетического спектра и волновых функций будем проводить с использованием метода огибающих волновых функций [6,16], хорошо применимого при толщинах квантово-размерных слоев  $d \geq 30 \text{ \AA}$ .

Рассмотрим квантовую яму CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe толщиной  $L$ , размещенную в слое барьерного материала CdTe, при  $x < 0.16$ . При таких условиях ширина запрещенной зоны в яме будет отрицательной. Будем

отсчитывать энергию от дна зоны проводимости ямы и обозначим сдвиг между зонами  $\Gamma_8$  ямы и  $\Gamma_8$  барьера как  $\Delta$ . Расположим центр координат посередине ямы, а ось  $z$  направим вдоль оси ямы.

Волновые функции электрона в яме находились в виде двух плоских противоположно направленных волн, а волновые функции электрона в барьере — в виде затухающих экспонент [16]:

$$\varphi(z) = \begin{cases} C_3 \exp[-ik_b(z + L/2)], & z < -L/2, \\ C_1 \exp[ik_a z] + C_2 \exp[-ik_a z], & -L/2 < z < L/2, \\ C_4 \exp[ik_b(z - L/2)], & z > L/2, \end{cases} \quad (1)$$

где  $C_1, C_2, C_3, C_4$  — неизвестные амплитуды волновых функций электрона в яме и в барьере, а  $k_a$  и  $k_b$  — волновые числа электрона в яме и барьере соответственно. Для получения дисперсионного уравнения для нахождения энергетического спектра электронов в яме волновые векторы  $k_a$  и  $k_b$  были записаны через энергию электрона  $E$ .

Следуя подходу [6,16], мы считали эффективную массу носителей заряда в яме и барьере пропорциональной разнице между энергией этих носителей и энергиями дна зон  $\Gamma_6$  в яме и барьере соответственно:

$$m_A = \frac{3}{4} (E - E_A) \frac{\hbar^2}{P^2},$$

$$m_B = \frac{3}{4} (E - V_s - E_A) \frac{\hbar^2}{P^2}, \quad (2)$$

где  $m_A$  — эффективная масса носителей в яме,  $m_B$  — эффективная масса носителей в барьере,  $V_s$  — величина разрыва зон  $\Gamma_6$ ,  $E_A$  — ширина запрещенной зоны Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te при заданном составе  $x$  и температуре отрицательная в рассматриваемом диапазоне составов,  $E$  — энергия носителей заряда, а  $P$  — матричный элемент Кейна, равный  $8.3 \cdot 10^{-8} \text{ эВ} \cdot \text{см}$ .

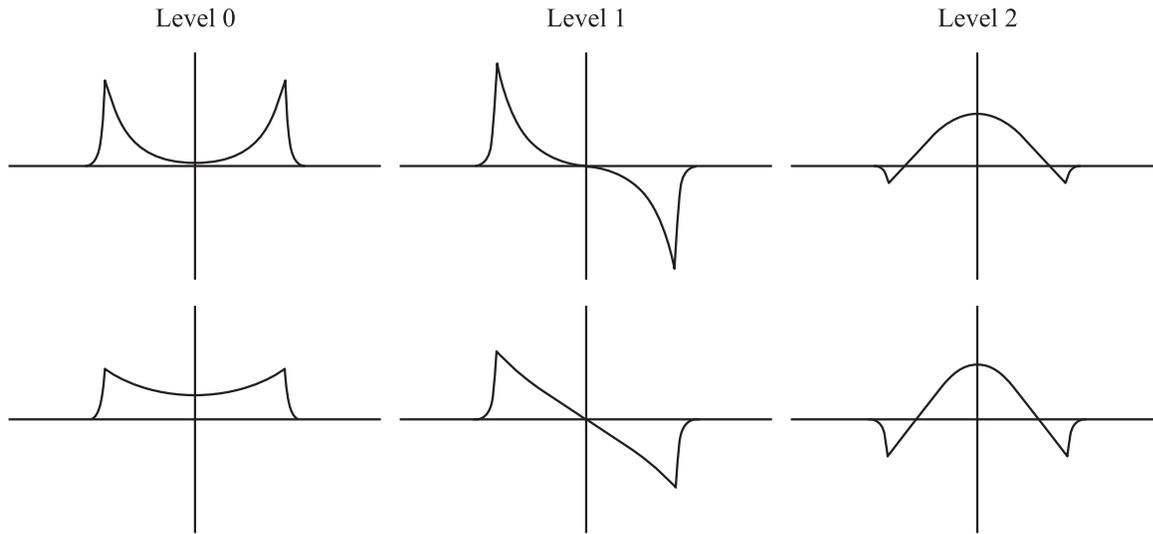
Величины  $k_a$  и  $k_b$  находились в приближении эффективной массы, считая, что компоненты этих векторов в плоскости ямы равны нулю [6,16–18]:

$$k_a = \frac{\sqrt{2Em_A}}{\hbar},$$

$$k_b = \frac{\sqrt{2(E + \Delta)m_B}}{\hbar}. \quad (3)$$

На гетероинтерфейсах  $z = -L/2$  и  $z = L/2$  должны удовлетворяться граничные условия [6] для волновой функции (1): а) непрерывность волновой функции и б) непрерывность отношения производной этой функции к ее эффективной массе. Из этих условий получаем дисперсионное уравнение для определения энергетического спектра локализованного электрона:

$$\frac{-i2k_a k_b \cos(Lk_a)}{(E_A - E)(E_A - E + V_s)} - \left[ \frac{k_a^2}{(E_A - E)^2} + \frac{k_b^2}{(E_A - E + V_s)^2} \right] \sin(Lk_a) = 0. \quad (4)$$



**Рис. 2.** Волновые функции электрона для квантовой ямы с  $L = 50$  нм,  $\Delta = 350$  мэВ. По горизонтали —  $z$ , пики волновых функций соответствуют интерфейсам. По вертикали — относительные единицы. Верхний ряд —  $x = 0$ , нижний —  $x = 0.1$ .

Для расчетов коэффициентов волновых функций в яме и барьере нам необходимо дополнить систему уравнений, получаемую подстановкой (1) в граничные условия, условием нормировки. Для поставленной задачи в качестве условия нормировки можно потребовать, чтобы

$$\int_{-L_b-L/2}^{L_b+L/2} \varphi(z)\bar{\varphi}(z)dz = 1. \quad (5)$$

Здесь  $L$  — ширина ямы, „тильда“ обозначает комплексно сопряженную величину, а  $L_b \geq 2L$ . Таким образом, мы получаем значения для неизвестных коэффициентов волновой функции электрона (1).

### 3. Влияние ширины ямы и состава $x$ на волновые функции электрона в квантовой яме

На рис. 2 изображены волновые функции электрона на различных уровнях квантовой ямы. Отметим несколько их характерных особенностей. Волновые функции имеют пики на гетероинтерфейсах. Наличие этих пиков [6] объясняется сменой знака эффективной массы носителей при переходе через гетероинтерфейс.

Интересно проследить за изменением области локализации волновой функции электрона при различных составах  $x$ . При  $x = 0$  волновые функции электронов двух нижних уровней локализованы на интерфейсах. С увеличением номера уровня волновая функция все больше осциллирует внутри ямы, и вероятность найти электрон „оттягивается“ с гетерограниц внутрь ямы. Таким образом, доминирующим механизмом рассеяния электронов двух нижних уровней будет рассеяние на гетерограницах, в то время как для электронов более

высоких уровней значительную роль может играть рассеяние внутри квантовой ямы. В частности, при азотных температурах для нелегированных КЯ важную роль играет рассеяние на продольных оптических фононах.

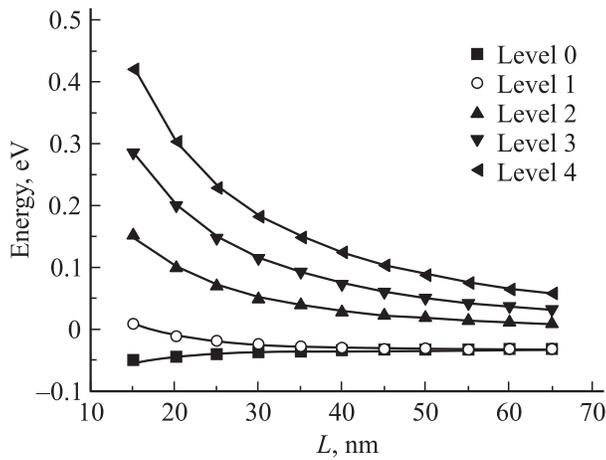
Ситуация меняется при увеличении состава  $x$  до величин, близких к пороговому значению  $x = 0.16$ . В этом случае для первых двух энергетических уровней вероятность нахождения электрона оттягивается от гетерограниц и практически равномерно распределяется по толщине ямы. В такой ситуации вероятность нахождения электрона возле гетерограниц становится достаточно малой, а следовательно, доминирующим механизмом рассеяния электронов на этих уровнях становится рассеяние внутри ямы.

Вместе с тем на локализацию электронов на двух нижних уровнях существенно влияет конкурирующий фактор — ширина квантовой ямы. Увеличение ширины ямы приводит к тому, что пики волновых функций на интерфейсах становятся более резкими, что для двух первых уровней равносильно увеличению вероятности найти электрон на гетерограницах.

### 4. Влияние разрыва валентных зон и ширины ямы на спектры электронов в квантовой яме CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe

#### 4.1. Ширина ямы и разрыв валентных зон

Обсудим влияние изменения ширины ямы  $L$  и разрыва зон  $\Delta$  на энергетические уровни электрона в квантовой яме. При ненулевом  $\Delta$  характерной особенностью рассматриваемой структуры является наличие одного или двух энергетических уровней ниже дна зоны проводимости ямы [16]. Как видно на рис. 3, поведение первых



**Рис. 3.** Зависимости спектра локализованных электронов в квантовой яме CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe от ширины ямы  $L$  для  $x = 0.06$  и  $\Delta = 350$  мэВ.

двух уровней электрона с изменением  $L$  существенно отличается от других уровней.

Во-первых, при изменении  $L$  энергия основного уровня изменяется слабо по сравнению с более высокими уровнями. С другой стороны, известно, что энергия основного уровня зависит от значения величины  $\Delta$  приблизительно линейно. Таким образом, расстояние между основным уровнем и дном зоны проводимости ямы определяется преимущественно величиной разрыва валентных зон. Во-вторых, при постоянных  $x$  и  $L$  величина  $\Delta$  сильнее всего влияет на энергии первых двух уровней.

Отметим появление в спектрах такого эффекта, как „слипание“ основного и первого энергетических уровней. Расстояние между первыми двумя уровнями слабо зависит от величины  $\Delta$ . В то же время, согласно рис. 3, увеличение ширины ямы  $L$  приводит к сближению этих уровней. Отметим, что, хотя разница в энергиях между этими уровнями может быть очень мала, тем не менее им соответствуют две различные волновые функции.

Важной особенностью энергетических спектров на рис. 3 является то, что первый уровень может находиться как над, так и под дном зоны проводимости ямы [16]. Его положение зависит от ширины ямы  $L$  и от величины разрыва валентных зон  $\Delta$ .

#### 4.2. Критерий количества интерфейсных уровней

Выведем аналитический критерий, который позволит определять количество уровней ниже дна зоны проводимости ямы в зависимости от  $x$ ,  $\Delta$  и  $L$ .

Проанализируем дисперсионное уравнение (4). Значение энергии  $E = 0$  всегда будет решением этого уравнения (хотя при ненулевых  $\Delta$  ему не соответствует реальное состояние электрона). Таким образом, когда первый уровень пересекает нуль энергии, значение энергии  $E = 0$  будет дважды решением дисперсионного уравнения.

Следовательно, в окрестности  $E = 0$  мы можем представить левую часть (4) в виде  $E^2 f(E)$ , что означает, что производная от левой части (4) в точке  $E = 0$  будет тождественно равна нулю. Разложив (4) в ряд в окрестности нуля энергии, получим следующий критерий, определяющий, при какой ширине ямы первый уровень энергии пересекает дно зоны проводимости ямы:

$$L = \sqrt{\frac{8P^2[E_A(x, T) + V_s]}{3E_A(x, T)^2\Delta}}. \quad (6)$$

Если при заданных  $x$  и  $\Delta$  ширина ямы  $L$  будет больше величины, получаемой из (6), то ниже дна зоны проводимости ямы будут находиться два энергетических уровня электрона. Соответственно при  $L$  меньше получаемого из (6) значения ниже дна зоны проводимости будет находиться только основной уровень электрона.

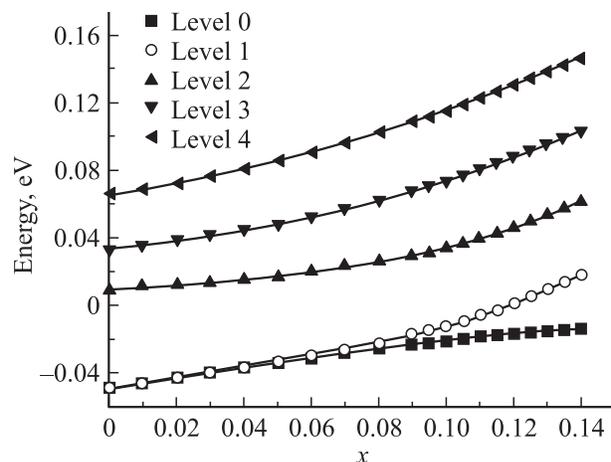
Полученный нами критерий (6) коррелирует с критерием Бастарда для КЯ CdTe/HgTe/CdTe [16, уравнение III.60]:

$$L_A > \frac{2|m_B|}{m_A} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2|m_B|\Delta}}.$$

Согласно (6), большее значение разрыва валентных зон приводит к тому, что переход первого электронного уровня под дно зоны проводимости ямы происходит при больших значениях состава  $x$ .

### 5. Влияние состава $x$ на спектры электронов в квантовой яме CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe

На рис. 4 видно, что изменение состава  $x$  сильно влияет на положение всех энергетических уровней электронов в яме, включая и первые два уровня. Увеличение состава  $x$  от нуля к 0.16 во всех случаях приводит к увеличению энергетического расстояния между основным и первым уровнями. Тем самым мы можем варьировать



**Рис. 4.** Зависимости спектра локализованных электронов от состава  $x$  для  $L = 50$  нм,  $\Delta = 350$  мэВ.

подвижности вдоль слоя и времена релаксации электронов, локализованных на основном уровне ямы.

Исходя из изложенного в разд. 3 важно отметить, что теоретическое моделирование наиболее перспективных с точки зрения быстродействия КЯ CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe с составами  $x$ , близкими к пороговому значению 0.16, может быть осуществлено без учета интерфейсных механизмов релаксации электрона. Это убирает необходимость использования эмпирических подгоночных параметров, возникающих при моделировании таких интерфейсных механизмов релаксации [19].

Отметим, однако, что при очень малых ширинах ямы (порядка 10 нм и менее) интерфейсные механизмы рассеяния вновь становятся важны.

## 6. Времена релаксации двумерных электронов в приближении времени релаксации

При детектировании терагерцового излучения важной задачей является моделирование процессов релаксации двумерного электронного газа, разогреваемого падающим ТГц излучением. Поскольку энергия такого излучения мала (единицы мэВ), разогретые электроны будут рассеиваться преимущественно с основного уровня КЯ.

Для выявления характерных зависимостей релаксации двумерных электронов в зависимости от параметров КЯ нами были проведены расчеты времен релаксации таких электронов в упругом приближении. Для азотных температур (77 К) такой подход позволяет качественно корректно оценить подвижность электронов [20]. При расчетах учитывался механизм рассеяния электронов на продольных оптических фононах (LO), который является доминирующим для рассматриваемых температур и параметров КЯ, для нелегированных КЯ. Расчет проводился в рамках модели диэлектрического континуума [19].

Согласно этому подходу, времена релаксации двумерных электронов, локализованных в КЯ, считались по известной формуле [19, формула 6.141]:

$$\frac{1}{\tau_s(k_0, n_0)} = \frac{2e^2\omega_{LO}}{L} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \left( N_{LO}(T, E_F) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \sum_{n,m} G(n_0, n, m) \int d^2q \frac{\delta[E_{n_0}(\mathbf{k}_0) - E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}) \pm \hbar\omega_{LO}]}{q^2 + (\pi m/L)^2}, \quad (8)$$

где  $\varepsilon_0$  и  $\varepsilon_\infty$  — статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости,

$$N_{LO}(T, E_F) = \frac{1}{(-1 + \exp[\hbar\omega_{LO}/(k_B T)])}$$

— концентрация фононов при заданной температуре и положении уровня Ферми,  $m$  — номер моды фононов,  $n_0$  и  $n$  — номера начального и конечного уровней электрона в КЯ,  $\mathbf{k}_0$  — импульс электрона в плоскости

КЯ до взаимодействия с фононом, а  $\hbar\omega_{LO}$  — энергия фонона. Здесь  $G(n_0, n, m)$  является квадратом интеграла перекрытия волновых функций электрона и фонона и определяется выражением

$$G(n_0, n, m) = \left( \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dz \varphi_{e0}(z) \varphi_e(z) \varphi_{ph}(z) \right)^2, \quad (9)$$

где  $\varphi_{e0}(z)$  и  $\varphi_e(z)$  — огибающие волновые функции начального и конечного состояний электрона, а  $\varphi_{ph}(z)$  — волновая функция продольного оптического фонона, описывающая симметрию электростатического поля фонона:

$$\varphi_{ph}(z) = \begin{cases} \cos(\pi m z / L), & m = 2k + 1, \\ \sin(\pi m z / L), & m = 2k. \end{cases} \quad (10)$$

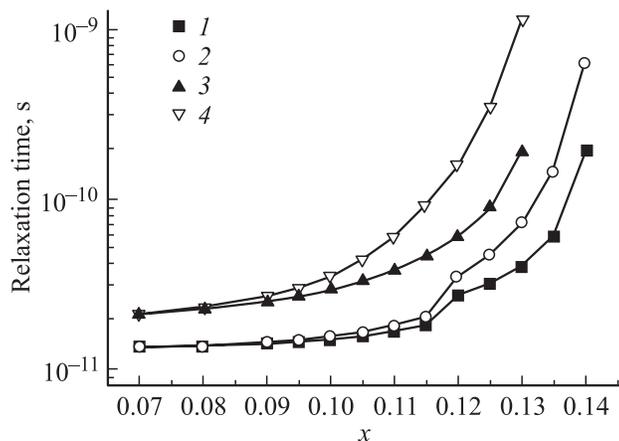
Как обсуждалось в разд. 4, КЯ рассматриваемого типа с инвертированной зонной структурой отличаются наличием интерфейсных уровней, лежащих ниже дна зоны проводимости ямы. Это приводит к тому, что в отличие от классических полупроводников с прямозонной структурой в таких КЯ основной уровень может приближаться к уровню Ферми и даже пересекать его. Это существенно меняет заполнение основного уровня и темп рассеяния двумерных электронов с этого уровня на продольных оптических фононах даже для случая нелегированных структур.

Поэтому важным при расчете релаксации электронов в таких структурах становится учет степени заполнения уровней в КЯ. Времена релаксации электронов с учетом степени заполнения уровней в КЯ находились по формуле:

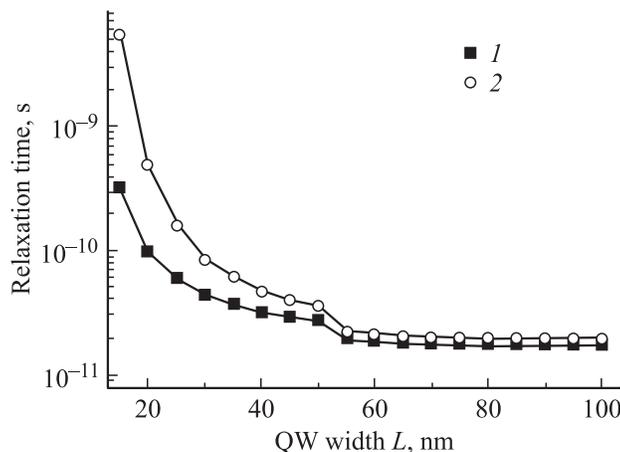
$$\frac{1}{\tau_s(k_0, n_0)} = \frac{2e^2\omega_{LO}}{L} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \left( N_{LO}(T, E_F) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \sum_{n,m} \left\{ G(n_0, n, m) [1 - F_n(T, E_F)] \times \int d^2q \frac{\delta[E_{n_0}(\mathbf{k}_0) - E_n(\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}) \pm \hbar\omega_{LO}]}{q^2 + (\pi m/L)^2} \right\}, \quad (11)$$

где  $F_n(T, E_F)$  — функция Ферми–Дирака для  $n$ -го уровня энергии в КЯ, а выражение  $[1 - F_n(T, E_F)]$  задает долю свободных мест на этом уровне.

В ходе расчетов принято, что энергия продольного оптического фонона постоянна и равна 0.017 эВ, как для трехмерного фонона в чистом материале HgTe. Мы исходили из стандартного приближения для нелегированных полупроводников, считая, что уровень Ферми находится посередине запрещенной зоны ямы. Результаты расчетов времен релаксации локализованных в КЯ электронов на продольных оптических фононах изображены на рис. 5 и 6.



**Рис. 5.** Зависимости времени релаксации двумерных электронов на продольных оптических фононах с основного уровня в квантовую яму рассматриваемого типа от состава  $x$  при  $\Delta = 350$  мэВ для  $L = 50$  (символы 1, 2) и 25 нм (символы 3, 4). Кривые без учета степени заполнения уровней (по формуле (8)) — символы 1 и 3, с учетом заполнения уровней (по формуле (11)) — символы 2 и 4.



**Рис. 6.** Зависимости времени релаксации двумерных электронов на продольных оптических фононах с основного уровня в квантовую яму рассматриваемого типа от ширины ямы  $L$  для  $x = 0.12$ ,  $\Delta = 350$  мэВ. Кривые без учета степени заполнения уровней (по формуле (8)) — 1, с учетом заполнения уровней (по формуле (11)) — 2.

Как видно на рис. 5 и 6, зависимости времен релаксации монотонны. Наблюдаемый на этих зависимостях локальный максимум обусловлен включением дополнительного канала релаксации электронов на продольных оптических фононах, связанного с переходами с основного уровня на первый возбужденный. Также во всех точках графиков задействован канал релаксации, связанный с рассеянием электронов с основного уровня обратно на основной уровень.

Перейдем к обсуждению особенностей времен релаксации, полученных при учете степени заполнения уровней. Как видно на рис. 5 и 6, при малых составах  $x$

и больших ширинах квантовой ямы  $L$  учет степени заполнения энергетических уровней не оказывает существенного влияния на времена релаксации. Это можно объяснить тем, что при таких параметрах структуры основной уровень будет находиться существенно выше уровня Ферми.

При составах  $x$ , близких к пороговому значению 0.16, и малых (20–50 нм) ширинах ямы наблюдается значительное уменьшение эффективности рассеяния электронов основного уровня на продольных оптических фононах. Такое явление можно легко объяснить, если учесть, что при таких параметрах КЯ расстояние между основным и первым возбужденным уровнями велико, а сам основной уровень близок к уровню Ферми. В такой ситуации возможно лишь рассеяние электронов с основного уровня обратно на основной уровень, а доля свободных состояний на нем мала. Вследствие этого, существенно падает темп релаксации и растет время релаксации, что и наблюдается на рис. 5 и 6.

Важно отметить, что проявление такого эффекта резкого роста времени релаксации возможно только при сочетании таких факторов, как близость состава  $x$  к пороговому значению 0.16 и малая (20–50 нм) ширина ямы  $L$ . Действительно, при нарушении хотя бы одного из этих условий вклад влияния интерфейсов на рассеяние носителей заряда будет существен, либо основной уровень будет выше уровня Ферми, и эффекта наблюдаться не будет. Нижний предел ширин ям, при которых будет наблюдаться данный эффект, может быть ограничен тем, что при очень малых ширинах ямы (порядка 10 нм и менее) существенное влияние на рассеяние электронов будут оказывать границы раздела  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$ .

Эффект значительного уменьшения эффективности рассеяния электронов основного уровня за счет того, что в КЯ рассматриваемого типа данный уровень близок к уровню Ферми, имеет важное практическое значение в нелегированных структурах, в которых рассеянием на заряженных примесях можно пренебречь. В этом случае небольшие изменения ширины  $L$  и состава  $x$  позволяют изменять времена релаксации и продольные подвижности локализованных электронов почти на 2 порядка.

Другим практическим применением данного эффекта может быть легирование стенок квантовой ямы, что позволит увеличить концентрацию электронов в квантовой яме и изменить положение уровня Ферми в ней, с тем чтобы получать данный эффект при больших ширинах ямы.

## 7. Заключение

Исследованы волновые функции, энергетические спектры и времена релаксации локализованных электронов в квантовой яме  $\text{CdTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$  при различных значениях ширины ямы  $L$ , величины разрыва валентных зон  $\Delta$  и состава  $x$ .

Показано, что значение разрыва валентных зон  $\Delta$  существенно влияет на положение первых двух элек-

тронных уровней. На положения более высоких уровней значение величины  $\Delta$  влияет слабо.

Установлено, что увеличение состава  $x$  от 0 до 0.16 приводит к существенному изменению положений всех энергетических уровней электрона в КЯ. Кроме того, такое изменение состава приводит к уменьшению локализации электронов первых двух уровней на интерфейсе и к увеличению вероятности нахождения их в середине ямы. Изменение же области локализации электрона приводит к изменению доминирующего механизма рассеяния локализованных электронов на этих уровнях.

Получен аналитический критерий для определения количества электронных уровней, которые находятся ниже дна зоны проводимости ямы, в зависимости от  $L$ ,  $x$  и  $\Delta$ .

Установлен эффект значительного (на 2 порядка) увеличения времени релаксации локализованных электронов в нелегированных КЯ CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe при малых (20–50 нм) ширинах КЯ и составах  $x$  из диапазона  $0 < x < 0.16$ , близких к 0.16. Данный эффект позволяет варьировать в широких пределах подвижности локализованных электронов при незначительных изменениях параметров КЯ.

## Список литературы

- [1] P.H. Siegel. Intern. J. High Speed Electron. Systems, **13**, 351 (2003).
- [2] B. Wittmann, S.N. Danilov, Z.D. Kvon, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretzky, R. Ravash, W. Prettl, S.D. Ganichev. *IEEE Proc. Joint 32nd Intern. Conf. THz Electronics*, **2**, 773 (2007).
- [3] T.G. Philips, K.B. Jefferts. Rev. Sci. Instrum. **44**, 1009 (1973).
- [4] F. Sizov. Optoelectron. Rev., **18**, 10 (2010).
- [5] Д.В. Морозов, К.В. Смирнов, А.В. Смирнов, В.А. Ляхов, Г.Н. Гольцман. ФТП, **39**, 1117 (2005).
- [6] G. Bastard. PRB, **25** (12), 1200 (1982).
- [7] J.N. Shulman, Y.C. Chang. Surf. Sci., **174**, 536 (1986).
- [8] J.M. Berroir, Y. Guldner, M. Voos. IEEE J. Quant. Electron., **QE-22** (9) (1986).
- [9] Z. Yang, J.K. Furdyna. Appl. Phys. Lett., **52** (6), 350 (1988).
- [10] C.K. Shih, W.E. Spicer. Phys. Rev. Lett., **58** (24), 450 (1987).
- [11] E.A. Kraut. J. Vac. Sci. Technol. A, **7** (2), 180 (1989).
- [12] P.M. Hui, H. Ehrenreich, N.F. Johnson. J. Vac. Sci. Technol. A, **7** (2), 203 (1989).
- [13] M. Truchsess, V. Latussek, C.R. Becker, E. Batke. J. Cryst. Growth. **159**, 1128 (1996).
- [14] C.R. Becker, V. Latussek, M. Li, A. Pfeuffer-Jeschke, G. Landwehr. J. Electron. Mater., **28** (6), 820 (1999).
- [15] D. Eich, K. Ortner, U. Groh, Z.H. Chen, C.R. Becker, G. Landwehr, R. Fink, E. Umbach. Phys. Status Solidi A, **173**, 261 (1999).
- [16] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (N.Y., Halsted Press, 1988).
- [17] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., **1**, 249 (1957).
- [18] G. Bastard. PRB, **24** (10), 1204 (1981).
- [19] V. Mitin, A. Kochelap, A. Stroschio. *Quantum heterostructures: microelectronics and optoelectronics* (Cambridge, Cambridge University Press, 1999).

- [20] J.J. Dubowski, T. Dietl, W. Szymanska, R.R. Galazka. J. Phys. Chem. Sol., **42**, 351 (1981).

Редактор Т.А. Полянская

## Modeling of relaxation times and energy spectra of quantum well CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe for variable valence band offset, well width and composition $x$

E.O. Melezhik, J.V. Gumenjuk-Sichevska, F.F. Sizov

Lashkariev Institute of Semiconductor Physics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
03028 Kyiv, Ukraine

**Abstract** Dependencies of relaxation times and energy spectra of quantum well (QW) CdTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe on the parameters of QW are numerically modeled in this work. These dependencies are considered for QW composition  $0 < x < 0.16$ . It is found that increase  $x$  from 0 to 0.16 changes localization of QW wave functions. A criterion for the number of interface states depending on QW parameters is presented for the first time. There is revealed effect of sharp increase of localized electrons relaxation time for small QW width and composition  $x$  close to 0.16.