

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского"

Оглавление

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Введение | 4 |
| 2 | Измерения и методики | 8 |
| 2.1 | Методика исследования фотолюминисценции | 8 |
| 2.2 | Методика исследования фотопроводимости | 10 |
| 3 | Расчет минимальной энергии Оже-процесса | 14 |
| 3.1 | Общие соотношения | 14 |
| 4 | Дизайн гетероструктур | 21 |
| 5 | Заключение | 23 |

1 | Введение

Одной из наиболее актуальных проблем современной прикладной физики является получение источников когерентного излучения терагерцового (THz) диапазона. Такие источники могли бы использоваться во множестве медицинских приложений, ввиду достаточно малого поглощения этого излучения тканями человека, что позволило бы разработать новые неинвазивные методы диагностики онкологии и иных заболеваний; другим возможным применением может стать спектроскопия сложных органических соединений, поскольку они имеют вращательные и колебательные степени свободы, имеющие соответствующие частоты лежащие именно в терагерцовом диапазоне.

В настоящее время имеется несколько способов генерации подобного излучения, которые, однако, имеют много недостатков. Одним из классов таких приборов являются квантово-каскадные лазеры (QCL). Они демонстрируют превосходные характеристики (высокий КПД, высокий уровень когерентности) в диапазоне 1-5 THz и выше 15 THz. Однако большая часть таких лазеров создается на основе полупроводников типа АЗВ5 (GaAs, PbSb или InP), которые имеют высокое поглощение на оптических фононах в диапазоне 5-15 THz. QCL на основе GaN подступают к спектральному диапазону 5 - 15 ТГц со стороны низких частот (относительно частот оптических фононов), но их рабочие характеристики требуют значительного улучшения [1].

Альтернативой QCL являются лазеры на основе межзонных переходах в узкозонных

полупроводниковых структурах. Такие лазеры намного проще в изготовлении, а также могут излучать в диапазоне 5-15 THz. Кроме того, их отличительной чертой является возможность перестройки частоты в достаточно широком диапазоне, за счет изменения температуры. Однако ограничивающим фактором является процесс безызлучательной Оже-рекомбинации. При этом традиционно ожидается, что этот процесс рекомбинации будет весьма существенным.

Оже-рекомбинация представляет собой безызлучательный трёхчастичный процесс. По типу носителей заряда, участвующих в процессе он делится на CCV и VVC процессы (процесс с участием двух электронов и дырки и процесс с двумя

дырками и электронами соответственно). В ходе этого процесса пара носителей с противоположным зарядом взаимоуничтожается и передаёт энергию и импульс третьему. В силу выполнения законов сохранения этот процесс является пороговым. Поэтому температура сильно влияет на темп таких процессов, а значит и на эффективность лазеров.

Повлиять на это можно, варьируя материалы/структуры и изменяя тем самым дисперсионные соотношения в них. В частности, существуют законы дисперсии, в которых такие процессы принципиально запрещены законами сохранения (к примеру Дираковский или графеноподобный закон дисперсии), а возможны структуры, в которых энергетический порог таких эффектов стремится к нулю.

Спектральный диапазон 5 - 15 ТГц к настоящему моменту частично перекрыт лишь диодными лазерами на основе халькогенидов свинца-олова, которые обеспечивают длины волн излучения вплоть до $46.5 \mu m$ [2]. Фактор, который снижает эффективность Оже-рекомбинации в PbSnSe(Te) [3], [4] - симметрия между законами дисперсии носителей в зоне проводимости и в валентной зоне. Однако их рабочие характеристики ограничены технологией роста: существуют труднопреодолимые проблемы в реализации квантовых ям (КЯ) для твердых растворов PbSnSe(Te) и остаточная концентрация носителей остается на высоком уровне $10^{17} cm^{-3}$. К тому же технология производства подобных полупроводников пока не отработана в достаточной мере, что не позволяет выращивать структуры с квантовыми ямами и единственной возможностью влиять на дисперсионное соотношение и ширину запрещенной зоны является изменение состава.

Существуют альтернативные полупроводниковые системы, которые позволяют приблизиться к «графеноподобному» закону дисперсии, но сохранить конечную ширину запрещенной зоны. Как было показано в многочисленных работах, одна из таких систем - гетероструктуры с КЯ на основе Hg(Cd)Te/CdHgTe. В отличие от графена, в структурах на основе HgCdTe (КРТ) с КЯ можно перестраивать ширину запрещенной зоны путем изменения ширины КЯ и содержания Cd в ней. Современная молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) обеспечивает высокое качество эпитаксиальных пленок КРТ не только на подложках CdZnTe, но и на «альтернативных» подложках GaAs. Высокое качество эпитаксиальных структур HgCdTe, выращенных на GaAs подложках, было подтверждено в ходе исследований фотопроводимости (ФП) и фотолюминесценции (ФЛ) в среднем и дальнем инфракрасном диапазонах ($\approx 15-30 \mu m$). Было получено стимулированное излучение (СИ) в КРТ структурах с КЯ на длине волны $\approx 19.5 \mu m$, в то время как ранее лазерная генерация в HgCdTe была продемонстрирована лишь в коротковолновой области среднего инфракрасного диапазона спектра (на длинах волн 2 - $5 \mu m$). Для структур, рассчитанных на генерацию длинноволнового излучения, требуется рост толстых эпитаксиальных слоев (общей толщиной до

20 мкм) для реализации диэлектрического волновода. Целью работы настоящей работы было исследование длинноволнового СИ из подобных структур и выявление факторов, определяющие наблюдаемые характеристики СИ, и возможных путей подавления безызлучательной рекомбинации в таких структурах. В работе было продемонстрировано, что возможно подавление Оже-процессов в подобных структурах за счет увеличения его порога. Рассмотрены способы его повышения за счет изменения толщины и состава квантовых ям, состава барьеров.

2 | Измерения и методики

2.1 Методика исследования фотолюминисценции

Основным методом исследования образцов в данной работе является измерение фотолюминисценции. Поскольку основной задачей является получение твердотельных лазеров на основе HgCdTe наногетероструктур, работающих в разумном диапазоне температур (77-300K), при котором возможно функционирование лазера с охлаждением жидким азотом, оценка зависимости интенсивности вынужденного или спонтанного излучения в зависимости от температуры и внутренней структуры образцов представляет особый интерес.

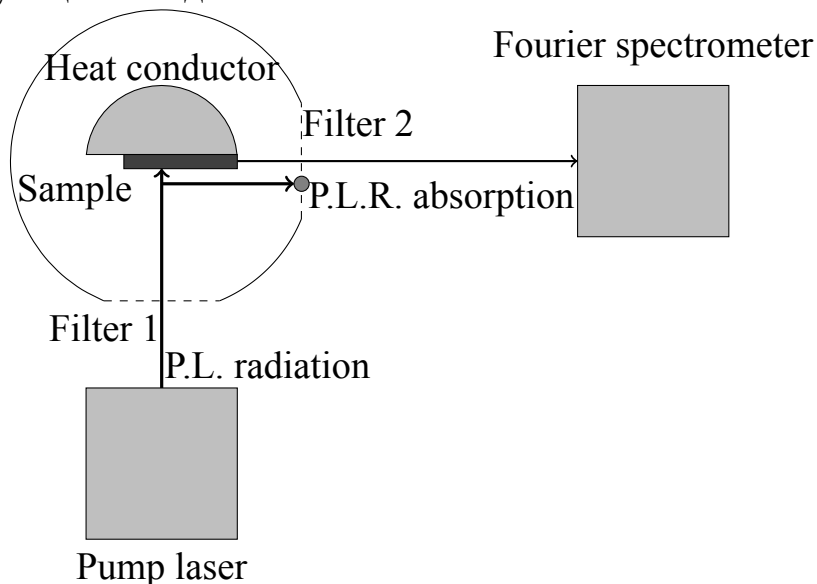
Исследуемый образец помещается в вакуумный криостат ARS-Cryotech с гелиевым охлаждением и возможностью нагрева образцов до необходимой температуры в пределах 7 — 300K. Входное отверстие как правило закрывается ZnSe окном, что позволяло заводить внутрь накачку во всем требуемом диапазоне 600 nm — 15 μm . На выходе же стояло окно из KRS-5, которое прозрачно в диапазоне 600 nm — 50 μm .

Структуры облучались лазерами с длинами волн !!!... с мощностями !!!... соответственно. При этом лазеры были импульсными или искусственно модулировались механическим способом.

При этом использовался фурье спектрометр Bruker Vertex V80, в режиме пошагового сканирования. Этот режим позволяет передвигать зеркало спектрометра дискретно, что позволяет более точно его позиционировать тем самым повышая эффективное разрешение и снижая коэффициент сигнал/шум. Кроме того в силу устройства установки зеркало может колебаться некоторое время после установки размывая картину, во избежание этого съём сигнала происходил через некоторое время после позиционирования.

В качестве приемника использовался болометр производства IRLabs с высокой чувствительностью в диапазоне !!!... . Также некоторые измерения были произведены при помощи полупроводникового детектора на основе MCT (также производства IRLabs), позволяющего улавливать излучение в диапазоне ... — 16 μm .

Во избежание паразитной засветки детекторов излучением накачки (интенсивность которого на много порядков превышало излучение как исследуемого спонтанного, так и вынужденного излучения образцов) использовался набор интерференционных и !!!... фильтров, позволяющий эффективно ослаблять излучение в неинтересующем нас диапазоне.

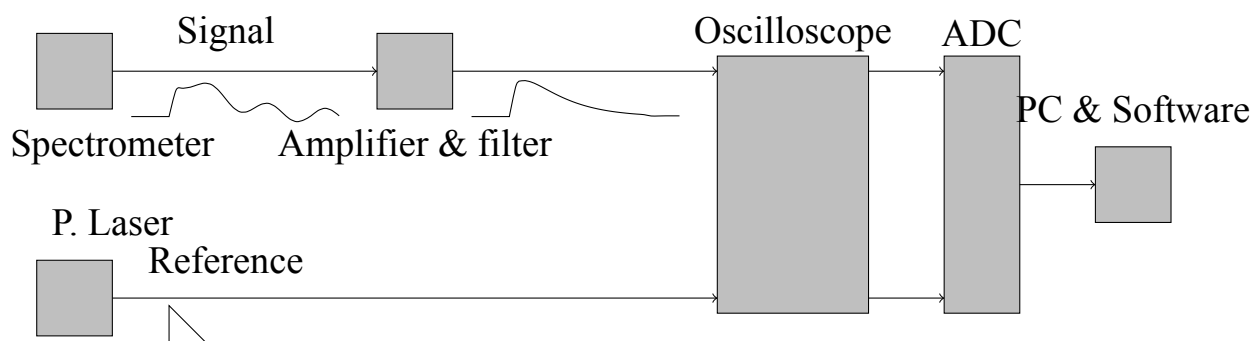


Геометрия задачи исследования фотолюминисценции

Для снижения влияния ЭМ наводок, а также для эффективного усиления использовались усилители напряжения Stanford SR560, включающие в себя регулируемые частотные фильтры 6db, 12db. Правильная настройка таких фильтров позволяет существенно повысить соотношение сигнал/шум, а также полностью нейтрализовать гармоники 50 Hz, которые являются основной компонентой наведённого шума.

В случае импульсного режима накачки использовался синхродетектор Stanford SR850, его использование позволяет существенно снизить время измерения за счет отсутствия необходимости программного усреднения результатов измерения встроенного АЦП.

Основным ПО при обработке спектров являлся Opus 7.0. В частности это позволяет записывать временно-разрешённые спектры, а также в существенной мере отфильтровать шумы посредством правильной рботки интерферограммы.



Принципиальная схема эксперимента фотолюминисценции

2.2 Методика исследования фотопроводимости

Иной важной техникой является измерение фотопроводимости. Этот метод позволяет с высокой степенью точности определять ширину запрещённой зоны полупроводниках, а также уровни размерного квантования в случае гетероструктур с квантовыми ямами. Это требуется для оценки содержания кадмия в барьерах и внутреннем пространстве квантовых ям, а также для проверки точности исполнения гетероструктуры в поперечном плоскости образца направлении.

Фурье спектрометр в данном случае работает в режиме непрерывного сканирования, а образец охлаждается иммерсивно. Для таких измерений важно исключить влияние спектра поглощения хладагента на результирующий спектр, для этого минимизируется расстояние от образца до фильтров, после которого в погружном устройстве следует вакуум.

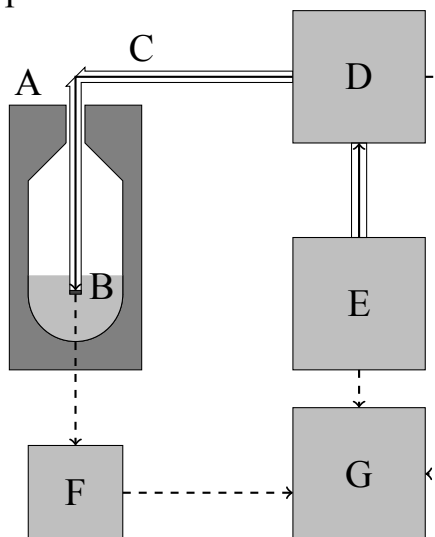
Также требуется отметить, что в таком режиме измерений в силу конструктивных причин невозможно использовать вакуумированный криостат с возможностью плавной регулировки температуры, ввиду этого доступно всего лишь три варианта измерений: при комнатной температуре 300 К, при температуре кипения жидкого азота 77К и при температуре кипения жидкого гелия 8К. В данной технике измерений мы можем рассматривать образец, как своего рода приемник сигнала.

Ввиду технической сложности для присоединения контактов иными способами в экспериментах использовалась простая пайка с индиевым припоем (выбор обусловлен схожим с образцами коэффициентом линейного температурного расширения, что позволяет обеспечить надежный контакт с поверхностью полупроводника при любой температуре).

В качестве эталонного источника излучения в данном типе измерений использовался глобар - источник излучения среднего инфракрасного излучения, имеющий спектр, близкий к спектру абсолютно чёрного тела. Такая спектральная

характеристика позволяет проводить точную нормировку сигнала с учетом сравнения ее с заведомой известной аппаратной функцией прибора.

Кроме вышеперечисленного оборудования использовался токовый усилитель Stanford SR570, который также способен выдавать ток смещения. В силу специфики образцов мы можем считать их сопротивление линейным, поэтому полученный в результате измерений, сигнал не нуждается в дополнительной обработке.



Принципиальная схема измерения фотопроводимости

A - сосуд Дюара, B - жидкий гелий или азот, C - оптический тракт, D - фурье-спектрометр, E - источник излучения, G - ПК и ПО.

В ходе работы были проведено множество экспериментов по измерению фотолюминисценции образцов. Однако для иллюстрации зависимости порога Оже-процесса и температуры гашения СИ были избраны два образца, рассчитанные на 14 и 18 μm длины волн.

Первым примером будет образец из ещё не вышедшей статьи [?]. Рассматривался образец, содержащий 10 несвязанных (имеющих меж собой широкие и "высокие" барьеры) квантовых ям состава $Hg_{0.903}Cd_{0.097}Te/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$ и толщиной 7.4 nm , что соответствует ширине запрещённой зоны около 90 meV ($\lambda \sim 14 \mu m$) при $T = 18 K$. Структура не была намеренно легирована; остаточная концентрация носителей р-типа, полученная на основе холловских измерений, составляла порядка единиц $10^{10} cm^{-2}$, а типичная плотность дислокаций $\sim 10^6 cm^{-2}$. Дизайн структуры ориентирован на эффективную локализацию света вблизи КЯ, для чего массив КЯ был выращен в волноводном слое толщиной в единицы μm . Выбранное направление роста (013) препятствует использованию сколотых граней кристалла в качестве зеркал резонатора, т.к. плоскости сколов образуют острый угол с плоскостью КЯ.

Второй образец использовался в статье [?] и представляет собой 10 КЯ состава $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}/\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$ с толщиной ям 8.7 nm . Этот образец имеет ширину запрещённой зоны порядка 70 meV ($\lambda \sim 18 \text{ }\mu\text{m}$) и позволяет наблюдать стимулированное излучение на этой длине волны в диапазоне 20-40 К. В остальном эта структура аналогична предыдущей.

Ширина запрещённой зоны была подтверждена методом фотопроводимости. Это позволило удостовериться в правильности последующих расчетов и подтвердить наблюдение именно межзонной фотолюминисценции.

В ходе измерения были получены следующие спектры фотолюминисценции:

[спектры]

Как можно видеть, при изменении температуры происходит сдвиг излучения в более коротковолновую область, а также снижение интенсивности стимулированного излучения. Отчасти снижение структуры может быть объяснено тем, что длина волны становится нерезонансной для внутренней волноводной структуры. С другой стороны, за счёт нетипичного поведения ширины запрещенной зоны от температуры (для большинства материалов ширина запрещённой зоны растёт с ростом температуры) начинается излучение с меньшей длиной волны, что не так пагубно сказывается на добротности волновода как её рост. Отсюда можно сделать вывод о том, что этот эффект в данном случае не так существенен. Куда больше интереса представляет сравнение времен излучательной и Оже-рекомбинации, несмотря на то, что с ростом ширины запрещенной зоны темп излучательных процессов в целом возрастает, как и порог безызлучательных процессов. Также возрастает населенность состояний с более высокой энергией, что, напротив, стимулирует Оже-рекомбинацию.

Отсюда возникает задача сравнения порога Оже-рекомбинации и тепловой энергии частиц, которые смогут характеризовать это снижение интенсивности и температуру гашения СИ в целом.

3 | Расчет минимальной энергии Оже-процесса

3.1 Общие соотношения

Одним из способов увеличения интенсивности стимулированного излучения является повышение разности населенностей, что в случае подобных структур приводит к задаче увеличения времени жизни носителей заряда, для как можно большей эффективности процесса излучательной рекомбинации. В связи с этим важно иметь возможность оценить минимальную энергию, носителей, при которой возможен Оже-процесс.

Как известно, Оже-рекомбинация является трехчастичным процессом. Причем в таком процессе могут участвовать квазичастицы разных подзон - в таком случае выражение для частоты переходов будет содержать матричный элемент перехода, который оказывается не равным нулю. Кроме того выражение для этой частоты будет содержать в дельта функцию импульсов, что соответствует закону сохранения:

$$W \propto \delta(\vec{k}_{1i} + \vec{k}_{2i} + \vec{k}_{1j} - \vec{k}_{3i}); \quad (3.1)$$

При этом индексы i, j - нумеруют типы квазичастиц (дырки или электроны). Все квазичастицы могут находиться в разных подзонах, иначе говоря в данном случае не существует какого-то дополнительного закона сохранения, связанного с отбором некоторых веток дисперсионного соотношения. $\vec{k}_{1i}, \vec{k}_{2i}, \vec{k}_{1j}$ - импульсы начальных частиц, \vec{k}_{3i} - конечной.

Здесь i, j - типы квазичастиц (дырки и электроны), $\vec{k}_{1i}, \vec{k}_{2i}, \vec{k}_{1j}$ - импульсы начальных частиц, \vec{k}_{3i} - конечной.

Здесь i, j - два сорта квазичастиц (в частности, возможно). Необходимо отметить наличие связи частот перехода:

$$\omega(\vec{k}_i^{(1)}, \vec{k}_i^{(2)}, \vec{k}_j \rightarrow \vec{k}_i^{\prime(2)}) \propto \delta_3(\vec{k}_i^{(1)} + \vec{k}_i^{(2)} + \vec{k}_j - \vec{k}_i^{\prime(2)}) \cdot \delta(\varepsilon_i(\vec{k}_i^{(1)}) + \varepsilon_i(\vec{k}_i^{(2)}) + \varepsilon_j(\vec{k}_j) - \varepsilon_i(\vec{k}_i^{\prime(2)})) \quad (3.2)$$

Очевидно, что в общем виде эта задача сложна по нескольким причинам:

- амплитуда такого рассеяния может быть найдена как с помощью диаграммной техники Келдыша [5], так и с помощью метода последовательных приближений [6, 7], однако в обоих случаях имеется сильное расхождение теории и эксперимента [ссылка];
- подобные расчеты весьма вычислительно сложны и не могут быть использованы в поиске оптимального дизайна структуры.

Однако есть и куда более простой способ - отыскание порога Оже-процесса. С учетом наличия возможности расчета дисперсионного соотношения методом Кейна 8x8 [8] и наличия законов сохранения в таких процессах задача может быть сведена к оптимизации некой характеристической функции.

Рассмотрим некоторые общие свойства процесса в котором участвуют две квазичастицы типа i и одна типа j . В таком случае выберем три подзоны для i частиц (двух начальных и конечной), которым соответствуют импульсы \vec{k}_1 , \vec{k}_2 , \vec{k}_f и дисперсионные соотношения ε_1 , ε_2 , ε_f и одну для частицы типа j , соответствующую \vec{k}_j , ε_j (подразумевается, что $\varepsilon_j \geq 0, \forall \vec{k}_j$). Будем оптимизировать (минимизировать) функцию, характеризующую "кинетическую" энергию частицы, оставшейся после участия в акте Оже-рекомбинации (что эквивалентно оптимизации "кинетической" энергии трех частиц до взаимодействия):

$$\varkappa = \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_j) - E_g. \quad (3.3)$$

С учетом условий:

$$\begin{aligned} \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_j - \vec{k}_f &= 0; \\ \varepsilon_1(\vec{k}_1) + \varepsilon_2(\vec{k}_2) + \varepsilon_j(\vec{k}_j) - \varepsilon_f(\vec{k}_f) &= 0; \end{aligned} \quad (3.4)$$

Подставим закон сохранения импульса сразу и воспользуемся методом неопределённых множителей:

$$L = \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_j) - E_g + \lambda \cdot \left(\varepsilon_1(\vec{k}_1) + \varepsilon_2(\vec{k}_2) + \varepsilon_j(\vec{k}_j) - \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_j) \right); \quad (3.5)$$

Тогда, дифференцируя, получим важный вывод: для минимальной энергии необходимо соблюдение условия

$$\nabla \varepsilon_1(\vec{k}_1) = \nabla \varepsilon_2(\vec{k}_2) = \nabla \varepsilon_h(\vec{k}_h); \quad (3.6)$$

Это можно интерпретировать, как необходимость равенства групповых скоростей квазичастиц.

Теперь рассмотрим ситуацию изотропного дисперсионного соотношения $\varepsilon(|\vec{k}|)$, очевидно в таком случае для минимизации энергии требуется коллинеарность

всех импульсов. В таком случае можно достаточно просто численно определить пороговую энергию Оже процесса, что и было сделано.

Однако прежде рассмотрим вырожденный и важный случай - приближение изотропной эффективной массы. В таком случае задача может быть решена аналитически. Выражения для начального импульса дырки и пороговой энергии представлены ниже:

$$\begin{aligned} E_{th} &= E_g \frac{m_c}{m_c(1+m_c/m_v)}; \\ p_h &= \sqrt{\frac{2m_c E_g}{(1+2m_c/m_v)(1+m_c/m_v)}}; \end{aligned} \quad (3.7)$$

Этот случай важен в первую очередь потому, что в случае, если вторые производные дисперсионных соотношений не меняют знак (т.е. производные растут монотонно), он может давать качественно верный результат, поскольку такие функции могут быть неплохо аппроксимированы квадратичной в диапазоне $\frac{p^2}{2m} \leq T$ (что подразумевает низкую населенность состояний с более высокой энергией).

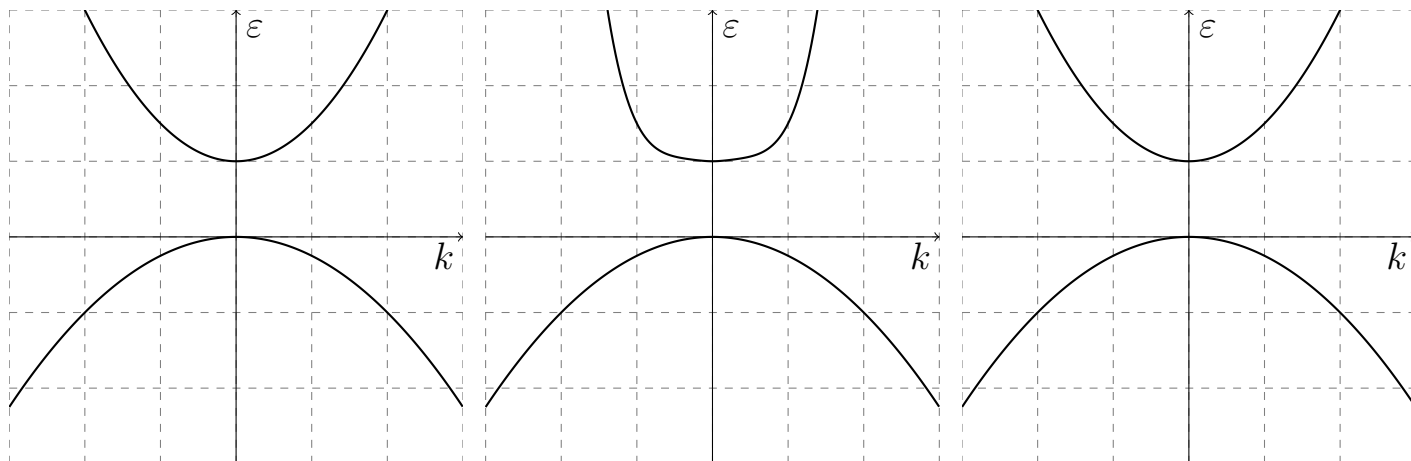
Теперь рассмотрим случай уже более сложных дисперсионных соотношений. Для этого входные данные считываются и по ним строится интерполяция, в виде сплайна третьего порядка. В дальнейшем производится оптимизация функции с условием:

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &= \varepsilon_f(k_1 + k_2 + k_h) - E_g; \\ \varepsilon_1(k_1) + \varepsilon_2(k_2) + \varepsilon_h(k_h) - \varepsilon_f(k_1 + k_2 + k_h); \end{aligned} \quad (3.8)$$

Также стоит отметить, что зачастую удобно использовать сплайны Акимы [9], поскольку они позволяют существенно уменьшить численные артефакты, связанные с переколебаниями сплайна. Это позволяет значительно увеличить точность вычислений, а также убрать ложные участки дисперсионного соотношения, имеющие необходимую (для минимума) радиальную компоненту градиента.

Следует отметить, что ввиду наличия большого количества локальных минимумов функции процесс её оптимизации представляется далеко нетривиальной задачей. В ходе работы были опробованы различные методы глобальной оптимизации - основанные на стохастических процессах (метод роя частиц, метод симуляции холодного отжига), а также методы сокращения исследуемой области. Однако наиболее эффективным является метод разбиения дисперсионного соотношения на участки, имеющие одинаковый знак первой производной и выбор наборов таких участков, на которых может быть реализована ситуация совпадения групповых скоростей квазичастиц. В дальнейшем выбиралась произвольная точка этого диапазона и от нее проводилась оптимизация методом AUGLAG [10] с наложенными ограничениями при помощи пакета NLOpt [11].

В результате такого рассмотрения были получены интересные закономерности в случае гетероструктур, содержащих ямы с большой концентрацией кадмия. В частности было выявлено несколько характерных паттернов.



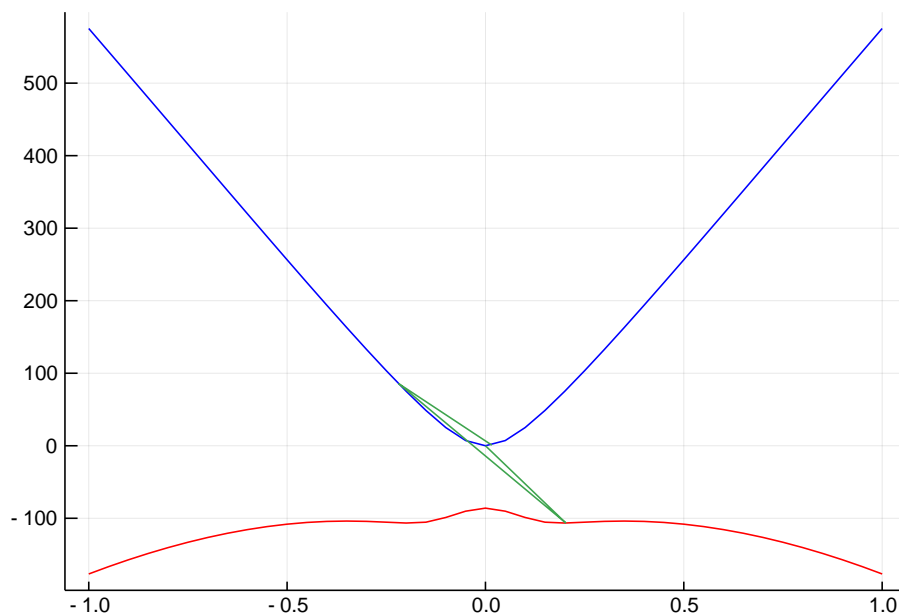
Можно видеть, что наличие дополнительных максимумов в дисперсионных соотношениях для электронов может значительно снижать порог Оже-процессов, за счет участия в рекомбинации квазичастиц с разными фазовыми, но одинаковыми групповыми скоростями. Это может приводить к существенно более быстрой зависимости интенсивности фотолюминисцентного излучения от температуры. Причем в структурах с большим содержанием кадмия в квантовых ямах наблюдается тенденция к образованию подобных побочных максимумов.

Отметим, что пороговая энергия в процессе СНСС определяется в основном кинетической энергией дырки (за счет большей эффективной массы). Надо учесть, что кинетическая энергия дырок в условиях инверсии населенности определяется не только температурой, но и положением квазиуровня Ферми в валентной зоне, это даёт некое размытие порога таких процессов.

В ходе большого числа экспериментов по описанной выше методике было установлено, что пороговая энергия Оже-рекомбинации структуры рассчитанная в изотропном приближении неплохо коррелирует с температурой затухания вынужденного излучения в образце. При этом существует примерное равенство $T_{max} \approx E_{th}/2$ [?]. Это может быть объяснено, если учесть крайне высокие темпы термализации носителей, что приводит к распределению, близкому к Больцмановскому.

Рассмотрим для начала образец, предназначенный для излучения на длине волны 14 nm.

Результаты расчётов спектра электронов и дырок для двух случаев приведены на рис. 1. В первом случае (рис. а) расчёт проведён для экспериментально исследованной Cd0.1Hg0.9Te/Cd0.65Hg0.35Te КЯ толщиной 7.4 nm, во втором случае (рис. б) расчёт проведён для HgTe/Cd0.65Hg0.35Te КЯ толщиной 3.9 nm.

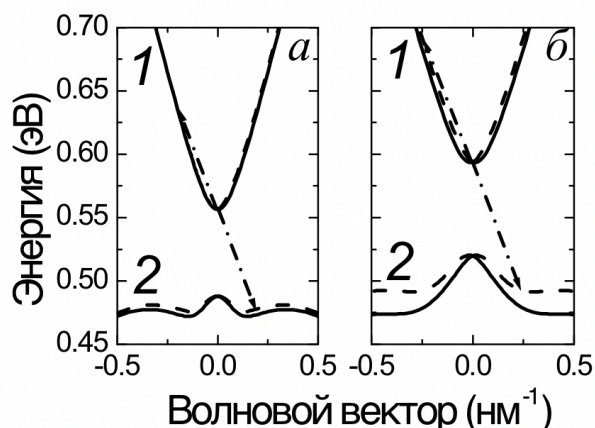


Как правило достаточно рассмотреть ССНС процесс, где электроны находятся на нижней подзоне, а ”дырки” соответственно на верхней, поскольку в большинстве структур именно он имеет наименьшую пороговую энергию, однако иногда это не справедливо. Для примера можно рассмотреть вышеописанную структуру для неё:

| Состав ямы, x | Состав барьера, x | Ширина ямы, nm | E_g | E_{th} |
|---------------|-------------------|----------------|-------|----------|
| 0.097 | 0.65 | 7.4 | 82.4 | 15.8 |
| 0.1 | 0.65 | 7.4 | 86 | 12.8 |
| 0.0 | 0.65 | 3.9 | 82.4 | 20.3 |
| 0.097 | 0.67 | 7.4 | 81.4 | 25.9 |

Также рассмотрим структуру, рассчитанную на $18\mu m$. Результаты расчётов спектра электронов и дырок для двух случаев приведены на рис. 1. В первом случае (рис. 1 а) расчёт проведён для экспериментально исследованной $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te/Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$ КЯ толщиной 8.7 нм, во втором случае (рис. 1 б) расчёт проведён для $HgTe/Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$ КЯ толщиной 4.2 нм.

TODO: Нарисовать по-человечески.



Из рисунка 1а видно, что для первого случая в валентных подзонах имеются дополнительные максимумы, располагающиеся ниже потолка валентной зоны на 7 мэВ. В $HgTe$ яме, окруженной $Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$, эти экстремумы практически отсутствуют (рис. 1 б). Как будет показано ниже, вид закона дисперсии дырок будет важен при определении величины пороговой энергии оже-рекомбинации.

Интересно сравнить пороговые энергии для структуры, описанной выше, и структур на основе квантовых ям $HgTe$. На рис. 2 представлена зависимость пороговой энергии оже-рекомбинации (вычисленной в модели) и толщины КЯ $HgTe$ от доли Cd в барьерах для двух температур: 20 К и 77 К при фиксированной энергии оптического перехода 70 meV. Из рисунка видно, что максимальная пороговая энергия (что оптимально с точки зрения максимальной температуры генерации стимулированного излучения) достигает величины 35 meV при доле Cd 0.67 для температуры 20 К и 27 meV при доле Cd 0.62 для температуры 77 К.

Для объяснения различия пороговых энергий в квантовых ямах $HgTe$ и $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te$ на !!! приведены начальные и конечные состояния электронов и дырок, соответствующие порогу оже-рекомбинации. Из сравнения видно, что «эффективная масса» дырок для оже-процесса в $HgTe$ квантовой яме существенно меньше, чем в $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te$ квантовой яме. Это связано с наличием в $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te$ квантовой яме ярко выраженного бокового экстремума в верхней валентной подзоне. Хорошо известно, что увеличение эффективной массы дырок приводит к снижению пороговой энергии Оже-процесса. Наличие максимума на

зависимости пороговой энергии от доли кадмия в $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ обусловлено наличием минимума «эффективной массы» дырок при определенной доле кадмия. Следует отметить, условность использованного здесь термина «эффективная масса» для верхней валентной подзоны, поскольку закон дисперсии в ней не квадратичный и, вообще говоря, немонотонный.

Таким образом, было продемонстрировано, что при заданной энергии межзонного

перехода пороговая энергия оже-рекомбинации в структурах $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с КЯ является немонотонной функцией от доли кадмия в барьере. При оптимальной концентрации кадмия в барьерах и КЯ из HgTe можно ожидать почти трехкратного повышения критической температуры стимулированного излучения по сравнению с прототипной структурой с $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}/\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$ КЯ.

4 | Дизайн гетероструктур

Во многом дизайн

рассматриваемых гетероструктур обусловлен технологическими особенностями их роста. Все образцы были получены посредством молекулярно - лучевой эпитаксии в ИФП СО РАН. Обязательным условием возможности создания таких структур является буфер между подложкой и участком с квантовыми ямами, обеспечивающий согласование периодов решётки кристалла, а также нивелирующий до некоторой степени разность в коэффициентах термического расширения образцов. Также буферный слой играет роль нижней частью волновода, рассчитанного на длину волны, соответствующую нижнему возбужденному состоянию квантовых ям.

Сам участок с квантовыми ямами растится в автоматическом режиме, что позволяет с высокой точностью выдерживать требуемый профиль прямоугольных квантовых ям, характерная толщина которых составляет 3-10 nm при ошибке порядка 0.1 nm. Однако подобный режим роста не позволяет обеспечивать требуемую точность концентрации, которая может нарушаться ввиду оседания части напыляемого материала на стенках камеры.

Также следует отметить влияние количества квантовых ям на возможный уровень фотолюминисценции. В данном случае мы можем рассматривать структуры как лазер с квазидвухуровневой средой. Такое рассмотрение возможно в силу сравнения времён накачки и теплового рассеяния: $\tau_p \gg \tau_e$. Как известно в таких средах огромный вклад вносят процессы перепоглощения испускаемых фотонов. При таком подходе видно, что КПД устройства будет снижаться при большом количестве КЯ, что обусловлено увеличением эффективного времени жизни инверсии населенностей и некоторым количеством потерь за счет паразитных безызлучательных механизмов рекомбинации (Оже и ШРХ). Однако в отдельности каждая квантовая яма имеет крайне низкий уровень поглощения излучения накачки. Из этого видно наличие некоего оптимального числа квантовых ям. В текущих образцах количество КЯ варьируется в диапазон 5-10 штук.

Вторым ключевым элементом конструкции подобных гетероструктур является волновод, который с одной стороны позволяет создать стоячую волну, которая при правильном подборе параметров позволяет локализовать пучности

ЭМ поля в точках, имеющих и наибольший квадрат модуля огибающей волновой функции электронов, что позволяет существенно увеличить матричный элемент перехода с нижнего энергетического уровня на первый возбужденный.

Однако в данном случае нас больше всего интересует связь между возникновением побочных максимумов и некоторым количеством кадмия, который оказывается напыленным внутри квантовых ям. Очевидно, что использование более чистых в этом смысле структур может предотвратить возникновение канала ОЖЕ рекомбинации типа ЕЕН через них. Однако кроме того методом численной оптимизации параметров подобных структур могут быть получены параметры, при которых порог Оже рекомбинации в теории будет являться бесконечным (в частности можно добиться почти гиперболического закона дисперсии). Однако на текущий момент подобные структуры не могут быть выращены в силу высоких требований к чистоте исполнения и прецизионного выдерживания толщины КЯ. Более того в таких случаях невозможно рассмотрение лишь радиальной составляющей дисперсионного соотношения, поскольку учёт зависимости $\varepsilon(\varphi)$ будет всегда давать более низкий порог Оже-рекомбинации.

Более того, наличие подобных боковых минимумов превращает подобную структуру в квазинепрямозонную, что может радикально снижать возможность излучательной рекомбинации из этих точек k-пространства.

Также в качестве осложняющего обстоятельства нельзя не упомянуть существенное различие концентрации кадмия в квантовых ямах в плоскости структуры, что, с одной стороны, обуславливает возможность изучения образцов с одинаковой структурой, с другой - плохо влияет на воспроизводимость измерений, а также осложняет сравнение полученных результатов с теорией.

Возможно, перспективным будет являться создание структур с легированием, что позволит искусственно повысить одного из типов носителей заряда и реализовать ситуацию в которой, вопреки дисперсионному соотношению будет превалировать тот или иной механизм Оже-рекомбинации. Это может быть полезным как с точки зрения фундаментальных исследований, так и с точки зрения простоты оптимизации структур (можно будет заботиться о темпе рекомбинации всего по одному механизму). Более того это может интересно в перспективе с позиции создания быстрых полупроводниковых детекторов, работающих в этой же области электромагнитного спектра (в данном случае оже процессы будут играть уже положительную роль).

5 | Заключение

В данной работе для волноводных гетероструктур с КЯ $\text{HgCdTe}/\text{CdHgTe}$ излучающих в области длин волн 14-18 мкм были проведены оценки максимальной энергии оже-рекомбинации ССНС процесса для различных параметров материала и толщин КЯ-м и составов барьерных слоев. Обнаружено, что максимальное значение пороговой энергии оже-рекомбинации равно $**$ для длины волны 14 мкм и $**$ для 18 мкм можно получить в КЯ-мах из «чистого» HgTe и барьерах с составами CdyHg1-uTe от $**$ до $**$. Результаты показывают перспективы создание межзонных лазеров на основе гетероструктур с КЯ $\text{HgCdTe}/\text{CdHgTe}$ в диапазоне длин волн от $**$ до $**$ работающих при температурах вплоть до $**$.

Литература

- [1] Anwar M. F., Crowe T. W., Manzur T. Terahertz physics, devices, and systems ix: Advanced applications in industry and defense // Proc. of SPIE Vol. — Vol. 9483. — 2015. — P. 948301–1.
- [2] Terahertz injection lasers based on a pbsnse solid solution with an emission wavelength up to 50 μm and their application in the magnetospectroscopy of semiconductors / KV Maremyanin, AV Ikonnikov, LS Bovkun et al. // Semiconductors. — 2018. — Vol. 52, no. 12. — P. 1590–1594.
- [3] Засавицкий □. Инфракрасная люминесценция и характеристики энергетического спектра полупроводников типа А4В6 // Труды ФИАН. Оптические и электрические свойства полупроводников. — 1993. — Vol. 224. — P. 3–118.
- [4] Dimmock J., Melngailis I., Strauss A. Band structure and laser action in pb x sn 1-x te // Physical Review Letters. — 1966. — Vol. 16, no. 26. — P. 1193.
- [5] Steiauf D., Kioupakis E., Van de Walle C. G. Auger recombination in gaas from first principles // Acs Photonics. — 2014. — Vol. 1, no. 8. — P. 643–646.
- [6] Andreev A., O'Reilly E. P. Theoretical study of auger recombination in a gainnas 1.3 μm quantum well laser structure // Applied physics letters. — 2004. — Vol. 84, no. 11. — P. 1826–1828.
- [7] Dutta N. K. Long wavelength semiconductor lasers // Technical Digest., International Electron Devices Meeting / IEEE. — 1988. — P. 304–306.
- [8] М.С. □. Терагерцовая спектроскопия квантовых ям $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$. — IPM RAS, 2013.
- [9] Akima H. A new method of interpolation and smooth curve fitting based on local procedures // Journal of the ACM (JACM). — 1970. — Vol. 17, no. 4. — P. 589–602.

- [10] Conn A. R., Gould G., Toint P. L. LANCELOT: a Fortran package for large-scale nonlinear optimization (Release A). — Springer Science & Business Media, 2013. — Vol. 17.
- [11] Johnson S. G. The nlopt nonlinear-optimization package. — 2014. — Access mode: <http://github.com/stevengj/nlopt>.