

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский  
государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (ННГУ)**

**Высшая школа общей и прикладной физики**

**Исследование пороговой энергии оже-рекомбинации в  
волноводных структурах с квантовыми ямами  
HgCdTe в области 14 и 18 мкм**

Выпускная квалификационная работа  
студента 4 курса бакалавриата ВШОПФ по  
направлению подготовки 03.03.02 Физика,  
профиль – фундаментальная физика,  
Куликова Никиты Сергеевича

Научный руководитель:  
Заведующий лабораторией ИФМ РАН,  
Кандидат физико-математических наук  
\_\_\_\_\_ С.В. Морозов

Рецензент:  
Старший научный сотрудник ИФМ РАН,  
Кандидат физико-математических наук  
\_\_\_\_\_ Р.Х. Жукавин

Декан ВШОПФ:  
Кандидат физико-математических наук  
\_\_\_\_\_ Е. Д. Господчиков

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Виды рекомбинации</b>	<b>5</b>
2.1	Общие сведения . . . . .	5
2.2	Порог оже-рекомбинации . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Измерения и методики</b>	<b>8</b>
3.1	Методика исследования фотолюминисценции . . . . .	8
3.2	Методика исследования фотопроводимости . . . . .	9
3.3	Рассматриваемые образцы . . . . .	11
3.4	Экспериментальные данные . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Расчёт порога оже-рекомбинации</b>	<b>15</b>
4.1	Метод расчёта . . . . .	15
4.2	Расчёт порога в HgCdTe . . . . .	17
4.3	Сравнение теории и эксперимента . . . . .	19
4.4	Зависимость оже-порога в зависимости от состава барьера . . . . .	21
4.5	Перспективные структуры . . . . .	21
<b>5</b>	<b>Заключение</b>	<b>24</b>

# 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 традиционна 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 электроном соответственно). В ходе этого процесса пара носителей с противополо-

ложным зарядом взаимоуничтожается и передает 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.

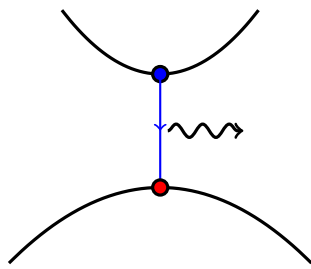
Существуют альтернативные полупроводниковые системы, которые позволяют приблизиться к «графеноподобному» закону дисперсии, но сохранить конечную ширину запрещенной зоны. Как было показано в многочисленных работах, одна из таких систем - гетероструктуры с КЯ на основе  $Hg(Cd)Te/CdHgTe$ . В отличие от 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 ( $\lambda = 15-30 \mu m$ ). Было получено стимулированное излучение (СИ) в КРТ структурах с КЯ на длине волны  $\lambda = 19.5 \mu m$ , 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.

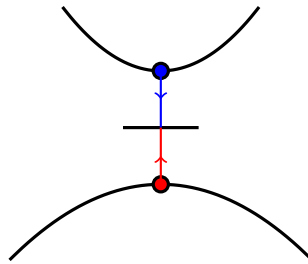
## 2 | Виды рекомбинации

### 2.1 Общие сведения

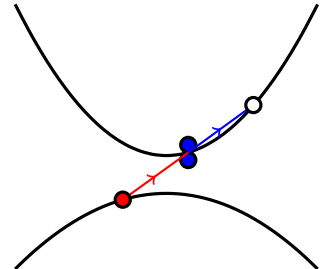
Как известно в полупроводниках существует несколько видов рекомбинации: излучательная, рекомбинация Шокли-Рида-Холла и оже-рекомбинация. При этом последние два процесса происходят без излучения ЭМ волн и приводят к паразитному уменьшению инверсии населённостей, пользуясь терминами лазерной техники. Излучательный же процесс является целевым при таком подходе.



Излучательная



Рекомбинация ШРХ



Оже-рекомбинация

Излучательная рекомбинация в целом делится на вынужденную и спонтанную, имеющие отличные коэффициенты Эйнштейна. Однако в силу требования наличия равновесия оказывается, что эти коэффициенты ( $\tau_{sp} = 1/A_{21}$ ,  $\tau_{st} = 1/B_{21}\rho(\nu)$ ) связаны:

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3};$$

А сам коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения ( $E_g$  - ширина запрещённой зоны;  $m_0$ ,  $m_h$ ,  $m_c$  - масса свободного электрона, эффективная масса электрона и дырки;  $\Delta$  - величина спин-орбитального расщепления;  $P^2$  - коэффициент Кейна) [5]:

$$A_{21} \propto \frac{(\varepsilon_g + \varepsilon_n + \varepsilon_p)P^2}{\sqrt{(m_c + m_h)T}} n_n n_p \sim n_n n_p \sqrt{\frac{\varepsilon_g}{T}};$$

$$P^2 \propto \frac{m_c + m_0}{m_c m_0} \frac{\varepsilon_g(\varepsilon_g + \Delta)}{\varepsilon_g + 2\Delta/3} \propto \frac{m_0}{m_0 m_c} \frac{\varepsilon_g \Delta}{\Delta} \sim \text{const};$$

Откуда следует вывод о том, что вероятность излучательной рекомбинации растёт с ростом ширины запрещённой зоны. В нашем же случае особый интерес представляют образцы с малым  $E_g$ , а потому излучательная рекомбинация зачастую оказывается подавленной.

Однако не менее важным оказывается влияние безызлучательных процессов - они снижают инверсию населённостей, и тем самым конкурируют с излучательными процессами. При больших длинах волн оказывается, что в силу низких темпов излучательной рекомбинации именно они определяют время жизни носителей и тем самым величину инверсии населённостей.

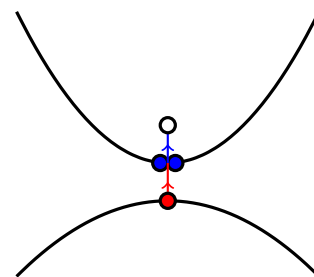
Исторически первым открытым процессом безызлучательной рекомбинации был процесс Шокли-Рида-Холла. Он протекает с участием примеси, а потому может не учитываться в случае чистых полупроводников.

В то же время существует ещё один процесс, который оказывается связан с видом дисперсионных соотношений для электронов и дырок. Оказывается возможным процесс в который вступает 3-и частицы: 2-е одного знака, 1-а - иного. В ходе такого процесса две частицы разных знаков взаимоуничтожаются, отдавая свою энергию и импульс третьей. Таким образом происходит не только уничтожение носителей заряда, но и существенный разогрев оставшихся.

## 2.2 Порог оже-рекомбинации

При этом этот процесс оказывается пороговым, иначе говоря существует минимальная "кинетическая" энергия трёх частиц, при которой становятся возможными такие переходы  $\varepsilon_{th}$ . Наличие этого порога объясняется требованием выполнения законов сохранения импульса и энергии.

В самом деле, если мы возьмём все три частицы в гамма точке, то есть нулевой начальной "кинетической" энергией мы не сможем добиться выполнения закона сохранения энергии - конечной частице просто негде будет находиться после прохождения такого процесса. А, если процесс с нулевой энергией невозможен, значит существует порог.



Его можно проиллюстрировать на примере параболических изотропных дисперсионных соотношений для электронов и дырок [6]. Оказывается, что в таком случае пороговая энергия и импульсы начальных частиц (два электрона в таком случае должны находиться в одном состоянии) равны:

$$\begin{aligned} E_{th} &= E_g \frac{m_c}{m_h(1+m_c/m_h)}; \\ p_h &= p_c \frac{m_h}{m_c} = \sqrt{\frac{2m_c E_g}{(1+2m_c/m_h)(1+m_c/m_h)}}; \end{aligned} \quad (2.1)$$

Как можно видеть, сама пороговая энергия пропорциональна ширине запрещённой зоны, откуда следует, что длинноволновые лазеры будут испытывать большее влияние этого типа рекомбинации.

Важно отметить, что не меньшую роль играет соотношение эффективных масс. Очевидно, что чем больше отношение  $\mu = m_c/m_h$ , тем больше будет порог.



## 3 | Измерения и методики

### 3.1 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—300 K. Входное отверстие как правило закрывается ZnSe окном, что позволяло заводить внутрь накачку во всем требуемом диапазоне  $600\text{ nm} - 15\text{ }\mu\text{m}$ . На выходе же стояло окно из KRS-5, которое прозрачно в диапазоне  $600\text{ nm} - 50\text{ }\mu\text{m}$ .

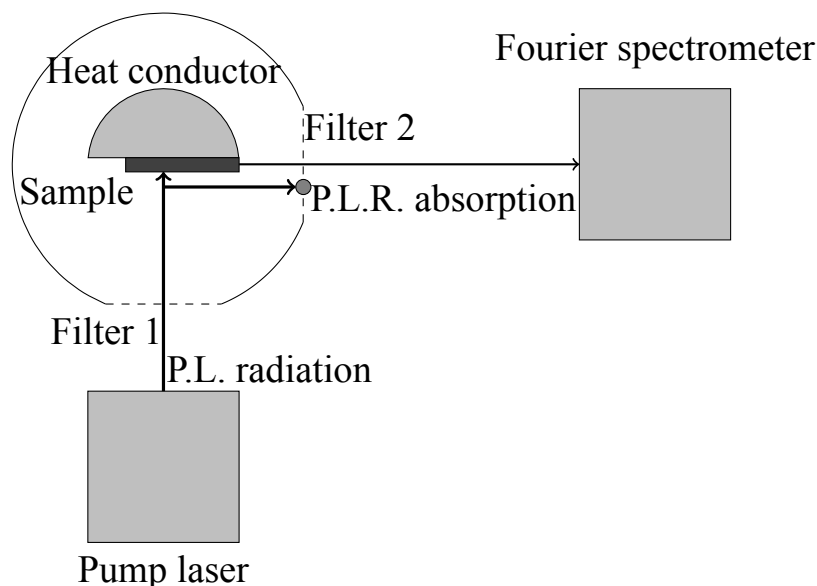
Структуры облучались лазером  $\text{CO}_2$  с длиной волны  $10.6\text{ }\mu\text{m}$  с мощностью 10 MW в импульсе соответственно. При этом лазеры были импульсными или искусственно модулировались механическим способом.

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  $16 - 300\text{ }\mu\text{m}$ . Также некоторые измерения были произведены при помощи полупроводникового детектора на основе MCT (также производства IRLabs), позволяющего улавливать излучение в диапазоне  $\dots - 16\text{ }\mu\text{m}$ .

Во избежание паразитной засветки детекторов излучением накачки (интенсивность которого на много порядков превышало излучение как исследуемого спон-

танного, так и вынужденного излучения образцов) использовался набор интерференционных и полупроводниковых фильтров, позволяющий эффективно ослаблять излучение в неинтересующем нас диапазоне.



### Геометрия задачи исследования фотолюминисценции

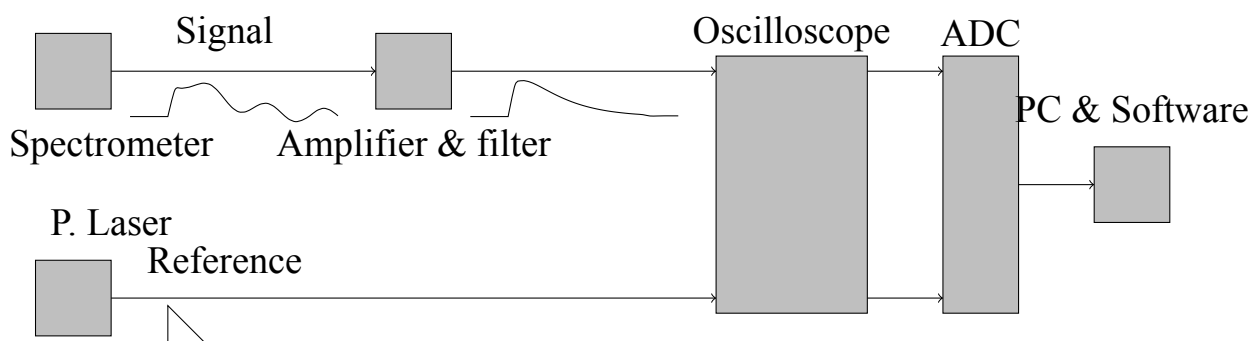
Для снижения влияния ЭМ наводок, а также для эффективного усиления использовались усилители напряжения Stanford SR560, включающие в себя регулируемые частотные фильтры 6db, 12db. Правильная настройка таких фильтров позволяет существенно повысить соотношение сигнал/шум, а также полностью нейтрализовать 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 Orus 7.0. В частности это позволяет записывать временно-разрешённые спектры, а также в существенной мере отфильтровать шумы посредством правильной рботки интерферограммы.

## 3.2 Методика исследования фотопроводимости

Иной важной техникой является измерение фотопроводимости. Этот метод позволяет с высокой степенью точности определять ширину запрещённой зоны по-



### Принципиальная схема эксперимента фотолюминисценции

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 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.

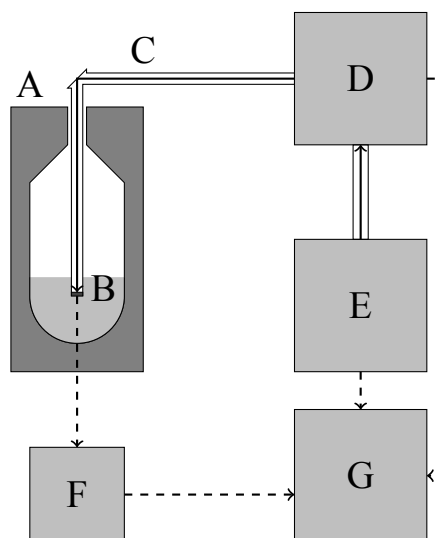
Также требуется отметить, что в таком режиме измерений в силу конструктивных причин невозможно использовать вакуумированный криостат с возможностью плавной регулировки температуры, ввиду этого доступно всего лишь три варианта измерений: при комнатной температуре 300 К, при температуре кипения жидкого 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 специфи-

ки образцов мы можем считать их сопротивление линейным, посему 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.

## 3.3 Рассматриваемые образцы

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 фотолуминисценции. В данном случае мы можем рассматривать структуры как лазер с квазидвухуровневой средой. Такое рассмотрение возможно в силу сравнения времён накачки и теплового рассеяния:  $\tau_p \gg \tau_\varepsilon$ . 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.

### 3.4 Экспериментальные данные

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

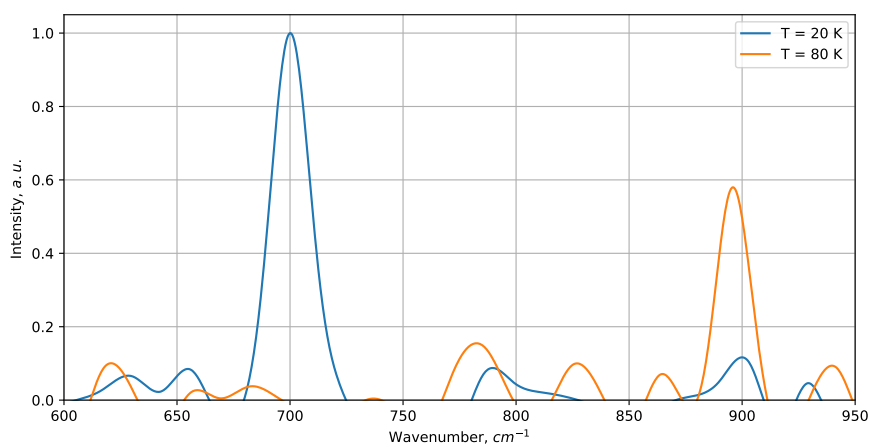
Первым примером будет образец из ещё не вышедше статьи [7]. Рассматривался образец, содержащий 10 несвязанных (имеющих меж собой широкие и ”высокие” барьеры) квантовых ям состава  $Hg_{0.903}Cd_{0.097}Te/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te$  и толщиной 7.4  $nm$ , что соответствует ширине запрещённой зоны около 90  $meV$  ( $\lambda \sim 14 \mu m$ ) 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  $\mu m$ . 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 представляет собой 10 КЯ состава  $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te/Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$  с толщиной ям порядка 8.7  $nm$ . Этот образец имеет ширину запрещённой зоны по-

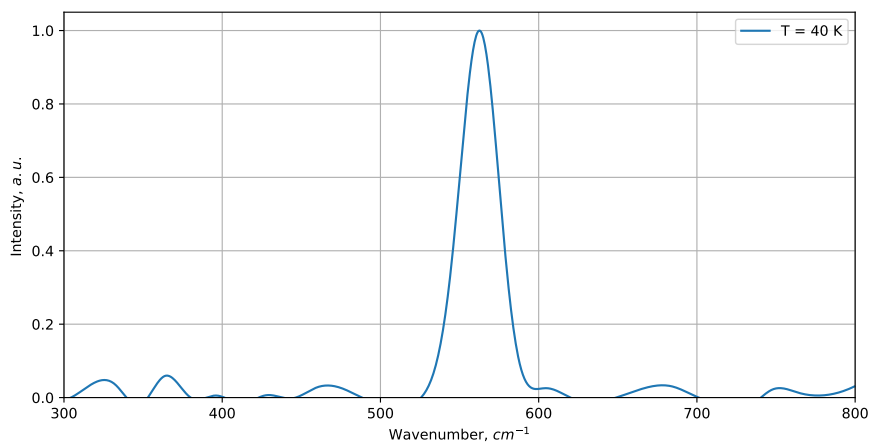
рядка  $70 \text{ meV}$  ( $\lambda \sim 18 \mu\text{m}$ ) и позволяет наблюдать стимулированное излучение на этой длине волны в диапазоне 20-50 К. В остальном эта структура аналогична предыдущей.

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 стимулированного излучения для структуры, рассчитанной на  $14 \mu\text{m}$ .**



**Спектр стимулированного излучения для структуры, рассчитанной на  $18 \mu\text{m}$ .**

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 запрещенной 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.

## 4 | Расчёт порога оже-рекомбина

### 4.1 Метод расчёта

Как известно в случае гетероструктур с квантовыми ямами состояние носителя заряда описывается несколькими квантовыми числами: номером зоны, дискретным квази-импульсом по направлению роста структуры (поскольку его движение в данном случае ограничено) и квази-импульсом, характеризующим движение в плоскости ямы. Для простоты мы не будем отличать нумерацию зон и нумерацию по поперечному импульсу, так называемая структура подзон. В таком случае мы можем гамильтониан, имеющий собственные значения  $\varepsilon_i(\vec{k})$ . В дальнейшем мы на некоторое время отвлечёмся от рассматриваемой задачи и рассмотрим некоторые общие соотношения.

Рассмотрим произвольный оже-процесс: как известно в него вступают две квази-частицы одинакового заряда и одна - противоположного, в результате остаётся лишь одна частица. В самом общем случае для такого процесса должны выполняться законы сохранения энергии и импульса, связывающие начальные состояния с индексами 1, 2, 3, с конечным  $f$ :

$$\begin{aligned}\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_f &= 0; \\ \varepsilon_1(\vec{k}_1) + \varepsilon_2(\vec{k}_2) - \varepsilon_3(\vec{k}_3) - \varepsilon_f(\vec{k}_f) &= 0;\end{aligned}\tag{4.1}$$

Однако в общем случае такие процессы могут происходить с частицами с самых разных подзон. Иными словами, если мы попытаемся найти частоту таких переходов  $W_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3 \rightarrow \vec{k}_f}$  и будем вычислять матричный элемент, то он окажется не равным нулю:  $\langle \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3 | \hat{H}_{int} | \vec{k}_f \rangle \neq 0$ . Это значит, что в нашем случае тоже возможны переходы с участием различных подзон.

Однако очевидно, что даже в таком случае далеко не при любом наборе импульсов начальных частиц можно найти конечное состояние так, чтобы выполнялись все законы сохранения. А также, можно видеть, что существует некая **пороговая энергия**  $\varepsilon_{th}$  - минимальная суммарная "кинетическая" энергия начальных частиц, при которой возможен такой процесс. Под "кинетической" энергией здесь понимается:



$$K = \varepsilon_i(\vec{k}) - \alpha E_g;$$

Здесь  $\alpha$  равно 0 для электронов и 1 для дырок, если мы выбираем за начало отсчёта энергии дно валентной зоны  $E_c = 0$ ,  $E_v = -E_g$  (в дальнейшем будет рассматриваться именно такая постановка задачи).

Для демонстрации наличия порога рассмотрим процесс с участием двух электронов и одной дырки (ССНС), имеющих начальную "кинетическую" энергию равную нулю  $K_i = 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Очевидно, что такой процесс соответствует переходу в гамма-точке и возможен только при условии, что дно второй подзоны имеет энергию ширины запрещённой зоны  $\varepsilon_{C2}(0) = E_g$ . Очевидно, что такой процесс является беспороговым, однако возможен лишь в ряде вырожденных случаев. В противном случае, такой процесс запрещён, а значит существует некий порог.

Попробуем формализовать эту задачу. Для начала заметим, что в силу закона сохранения конечная энергия частицы напрямую связана с начальными "кинетическими". Если мы рассмотрим ССНС процесс, то "кинетическая" энергия конечной частицы будет равна "кинетической" энергии начальных за вычетом  $E_g$ , что соответствует получению энергии от рекомбинации. Аналогично, и для ННСН процесса, однако при выбранном способе отсчёта энергии из полной конечной энергии потребуются вычитать уже  $2E_g$  - один за счет энергии от рекомбинации, второй - из за того, что  $E_v = -E_g$ .

Тогда нам нужно будет найти минимальную энергию конечной частицы, учитывая однако законы сохранения (закон сохранения импульса уже учтён неявно), т.е. нам потребуется вычислить:

$$\begin{cases} \varepsilon_{th} = \min_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} K(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3); \\ K = \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3) - \beta \cdot E_g; \\ \beta = \begin{cases} 1 & \text{ССНС} \\ 2 & \text{ННСН} \end{cases}; \\ \varepsilon_1(\vec{k}_1) + \varepsilon_2(\vec{k}_2) - \varepsilon_3(\vec{k}_3) - \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_h) = 0; \end{cases} \quad (4.2)$$

В частности для решения такой задачи мы можем использовать метод неопределённых множителей лагранжа. В таком случае задача сведётся к поиску экстремума функции (здесь уже неявно учтён закон сохранения импульса):

$$L(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \lambda) = \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3) - \alpha E_g + \lambda \cdot (\varepsilon_1(\vec{k}_1) + \varepsilon_2(\vec{k}_2) - \varepsilon_3(\vec{k}_3) - \varepsilon_f(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_j)); \quad (4.3)$$

И выбора из них того, который имеет наименьшую энергию. Однако при этом возникает необходимое условие равенства нулю производных типа:

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{k}_i} = \mp \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial \vec{k}_f} \bigg|_{\vec{k}_f = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} (1 + \lambda) + \lambda \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \vec{k}_i} = 0;$$

Очевидно, что комбинируя их попарно, мы увидим необходимое условие для для пороговой энергии - групповые скорости частиц в таком процессе должны быть равны:

$$\nabla \varepsilon_1(\vec{k}_1) = \nabla \varepsilon_2(\vec{k}_2) = \nabla \varepsilon_h(\vec{k}_h); \quad (4.4)$$

Существует ещё один важный частный случай - аксиально-симметричные дисперсионные соотношения  $\varepsilon(|\vec{k}|)$ . В таком случае для процесса, отвечающего минимальной начальной кинетической энергии, в силу описанного выше необходимого требования равенства групповых скоростей, волновые вектора начальных состояний должны быть по меньшей мере коллинеарны друг другу, а следовательно и волновому вектору конечной частицы.

## 4.2 Расчёт порога в HgCdTe

Очевидно что все предыдущие рассуждения не имеют никакого смысла, если нам не известны дисперсионные соотношения для частиц. Однако чтобы получить его нам необходимо конкретизировать рассматриваемую физическую задачу. В данной работе рассматривались квантовые ямы HgCdTe/CdHgTe, выращенные на плоскости [013] на буфере CdTe. Такое направление было выбрано в силу технологических причин (более высокая скорость роста), буфер же отвечает за постоянную решётки и напряжения в кристалле, которые могут существенно повлиять на вид дисперсионного соотношения.

Сам расчёт дисперсионного соотношения осуществлялся по методу огибающих функций в приближении Бёрта-Формана на основе гамильтониана Кейна 8x8 [8]. При расчётах учитывалась встроенная деформация. Зонная структура предполагалась аксиально- симметричной. В направлении роста гетероструктуры волновая функция состояния раскладывалась по плоским волнам. Расчёты производились при помощи программы, написанной М.С. Жолудевым [9].

На выходе этой программы получалось точно аппроксимированное дисперсионное соотношение. В дальнейшем оно аппроксимировалось сплайнами третьего порядка, что обеспечивало достаточную гладкость для задачи оптимизации. Однако, как выяснилось, традиционные кубические сплайны давали неверные ответы в силу численных ошибок. Эти ошибки представляли собой переколебания аппроксимированной функции вблизи экстремумов. Как видно из вышеизложенного такие переколебания могут приводить к рождению участков с ложной групповой

скоростью, а это, в свою очередь приводило к неверным ответам. Такую проблему позволили решить сплайны Акимы [10], которые при той же гладкости имеют отличные граничные условия и не приводят к подобным ошибкам. Для работы со сплайнами применялся математический пакет Dierckx [11] для языка программирования Julia.

После построения гладкой аппроксимации дисперсионных соотношений нам требуется найти минимум функции 4.2 с наложенными условиями. Очевидно, что такая функция может (и как правило имеет) не один минимум, поэтому приходится говорить про глобальную оптимизацию. Для её осуществления дисперсионные соотношения виртуально делятся на отрезки с одним знаком производной (с одним направлением групповой скорости) и второй производной. Выбираются тройки участков, на которых начальные частицы вообще могут иметь одинаковую групповую скорость. На этих участках ставятся начальные состояния и из них производится локальная оптимизация по алгоритму AUGLAG [12] в математическом пакете NLOpt [13]. Очевидно, что для каждой тройки таких отрезков может быть только одна точка в пространстве  $k_1, k_2, k_3$  для которой может выполняться условие равенства групповых скоростей и законы сохранения. Также на основе апостериорного знания 4.5 не имеет смысла рассмотрение процессов с энергией выше  $2T$ , где  $T$  - температура, при которой производился расчёт дисперсионного соотношения. В следствии рассмотрения всех таких наборов выбирается один, имеющий наименьшую начальную кинетическую энергию - он и соответствует пороговому процессу.

Как было показано ранее особую важность для таких процессов имеет равенство групповых скоростей начальных частиц. Поскольку электроны, как правило, имеют крайне низкие эффективные массы, при любых разумных условиях они не могут иметь сколь-нибудь большие импульсы. В то же время эффективная масса дырок намного больше, что позволяет им иметь большие импульсы  $k_c \ll k_v$ . К тому же в случае квантовых ям дисперсионные соотношения для легких и тяжелых дырок могут иметь боковые максимумы. Эти боковые максимумы имеют потолки, лишь немного уступающие гамма-точке  $E_v - E_s \ll E_g$ . Для нас это имеет следующие последствия:

- боковые максимумы оказываются заселёнными;
- боковые максимумы не участвуют в процессе излучательной рекомбинации;
- эффективная масса в этих максимумах велика  $m_{hs} \gg m_c$ , что позволяет дыркам, вступающим в оже-процесс иметь большие импульсы.

Из этого видно, что подобные побочные максимумы могут существенно снижать пороги оже-рекомбинации, ухудшая тем самым потребительские свойства таких структур.

Другой интересной возможностью являются процессы с участием двух дырок и электрона (ННСН). Как правило такие процессы имеют большие пороговые энергии за счёт большей эффективной массы парных частиц. Однако именно они могут приводить к возникновению беспороговых переходов, поскольку  $E_v - E_{hh}(0) \ll E_{C2} - E_c$ , что позволяет при перестройке температуры наблюдать беспороговые резонансные оже-процессы. Также в силу возможного наличия боковых максимумов имеется большая вероятность подобрать подобрать точки с равными групповыми скоростями.

### 4.3 Сравнение теории и эксперимента

Для демонстрации значимости порога оже-рекомбинации можно привести эмпирическую формулу, связывающую порог оже-процессов и максимальную температуру, при которой наблюдается стимулированное излучение [14]:

$$T_{max} \approx \varepsilon_{th}/2; \quad (4.5)$$

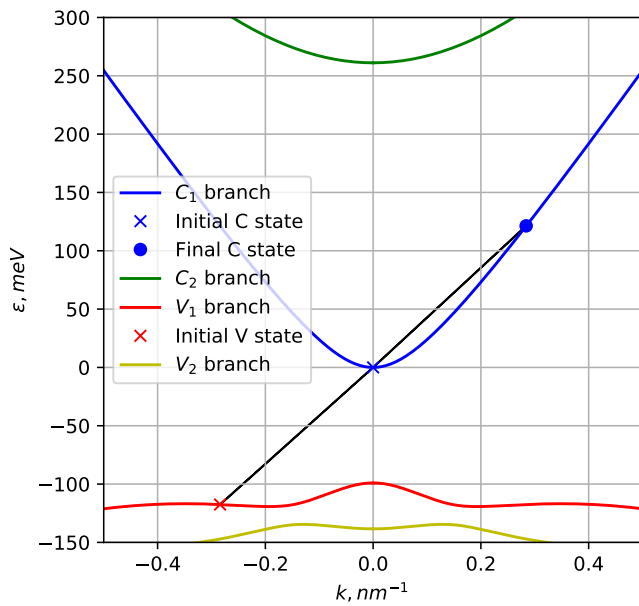
Эта формула, к сожалению, не имеет внятного теоретического обоснования, однако работает для подавляющего большинства реально существующих гетероструктур HgCdTe с квантовыми ямами. Её можно интерпретировать, как условие на достаточную заполненность носителями заряда состояний, с которых разрешены такие переходы. Особое внимание стоит уделить в данном случае заполненности валентной зоны, поскольку, как было оговорено выше, чаще всего именно дырки обуславливают энергетику оже-процесса.

В качестве примеров рассмотрим структуры, рассмотренные в экспериментальной части: для начала возьмём образец, предназначенный для излучения на длине волны  $14 \mu m$  и рассмотрим гипотетическую структуру с ямами, не содержащими кадмия.

Результаты расчётов спектра электронов и дырок для двух случаев приведены на рисунке. В первом случае (рис. а) расчёт проведён для экспериментально исследованной  $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te/Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$  КЯ толщиной  $7.4 \text{ nm}$ , во втором случае (рис. б) расчёт проведён для  $HgTe/Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$  КЯ толщиной  $4.3 \text{ nm}$ . В обоих случаях ширина запрещённой зоны составляет при  $80 \text{ K}$  порядка  $83 \text{ meV}$ .

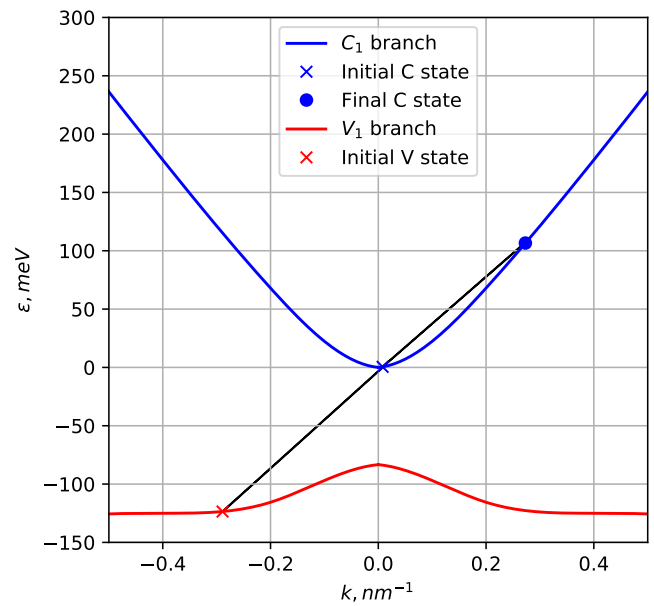
Оказывается, что в данном случае наименьшую пороговую энергию имеет процесс ССНС с участием нижней подзоны зоны проводимости и верхней из валентной зоны. Как можно видеть именно "загрязнённость" ям кадмием обеспечивает наличие боковых максимумов и снижение пороговой энергии [15].

Аналогично поступим и со структурой рассчитанной для излучения на длине волны  $18 \mu m$ . Результаты расчётов спектра электронов и дырок для двух случаев



**Рис. а: Образец с "грязными"КЯ.**

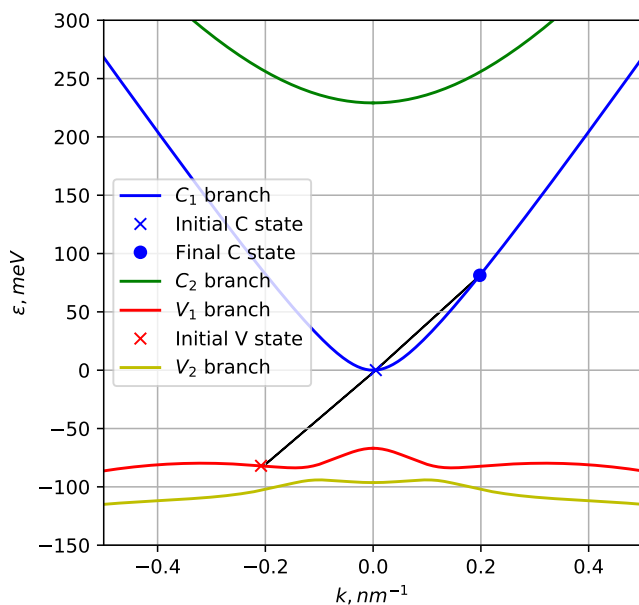
Пороговая энергия  $\varepsilon_{th} \approx 18.6 \text{ meV}$ .



**Рис. б: Образец с "чистыми"КЯ.**

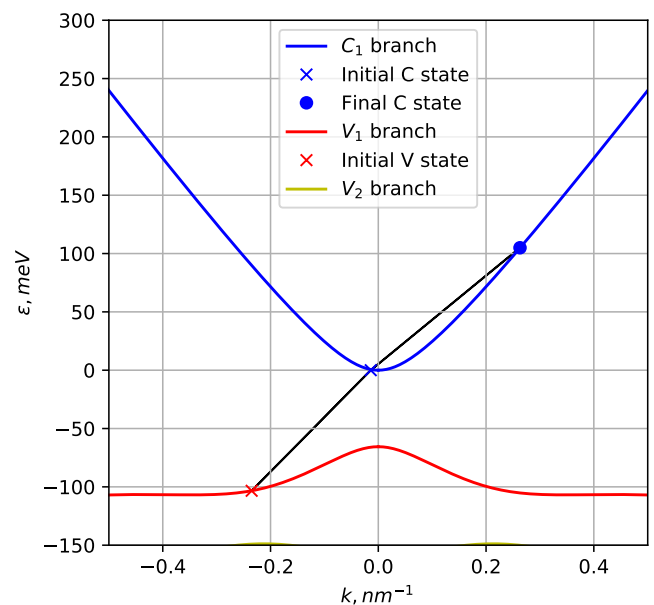
Пороговая энергия  $\varepsilon_{th} \approx 23.3 \text{ meV}$ .

приведены на рисунке ниже. В первом случае (рис. в) расчёт проведён для экспериментально исследованной  $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}/\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$  КЯ толщиной 8.7 nm, во втором случае (рис. г) расчёт проведён для  $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$  КЯ толщиной 4.4 nm.



**Рис. в: Образец с "грязными"КЯ.**

Пороговая энергия  $\varepsilon_{th} \approx 15 \text{ meV}$ .



**Рис. г: Образец с "чистыми"КЯ.**

Пороговая энергия  $\varepsilon_{th} \approx 37.3 \text{ meV}$ .

Из рисунка а видно, что для первого случая в валентных подзонах имеются дополнительные максимумы, располагающиеся ниже потолка валентной зоны на 7 meV. В  $\text{HgTe}$  яме, окруженной  $\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$ , эти экстремумы практически отсутствуют (рис. г). Как было показано ниже вид дисперсионного соотношения может существенно влиять на порог оже-процессов.

## 4.4 Зависимость оже-порога в зависимости от состава барьера

Рассмотрим влияние высоты барьеров на порог оже-процессов. Для этого рассмотрим подробнее структуру для излучения на длине волны  $18 \mu m$ , в силу большего интереса к длиноволновому стимулированному излучению.

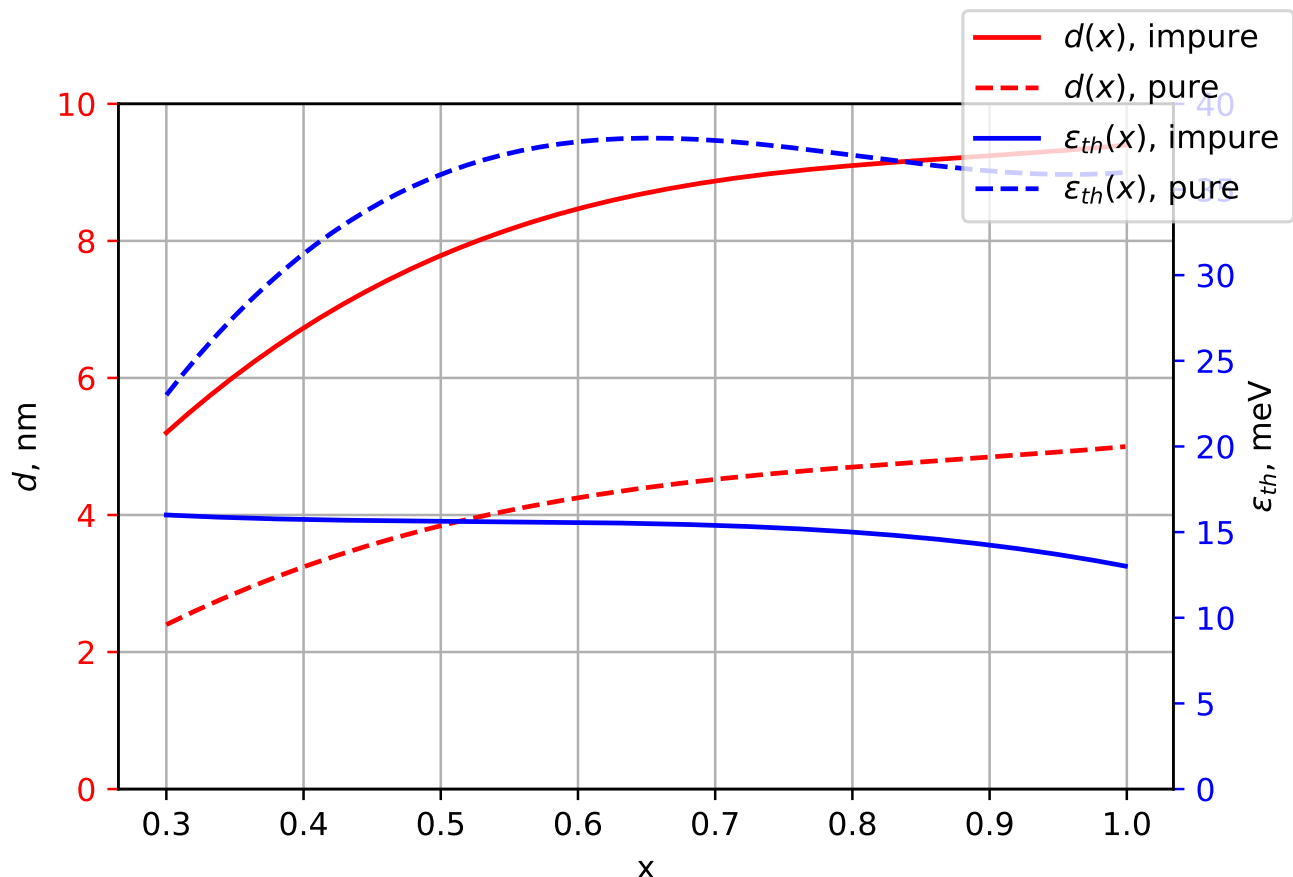
Интересно сравнить пороговые энергии для структуры, описанной выше, и структур на основе квантовых ям HgTe. На рисунке ниже представлена зависимость пороговой энергии оже-рекомбинации (вычисленной в модели) и толщины КЯ при двух разных концентрациях состава ям от доли Cd в барьерах для температуры 40K, при фиксированной величине ширины запрещённой зоны, составляющей  $67 meV$ . Из рисунка видно, что максимальная пороговая энергия (что оптимально с точки зрения максимальной температуры генерации стимулированного излучения) достигает величины  $38 meV$  при доле Cd 0.67 и чистой яме, а также  $17 meV$  при высоте барьеров в 0.3.

Из сравнения начальных состояний частиц для случаев с "чистой" и "грязной" ямой в предыдущем разделе 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 HgTe/ $Cd_xHg_{1-x}Te$  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 HgTe/ $Cd_xHg_{1-x}Te$  с КЯ является немонотонной функцией от доли кадмия в барьере. При оптимальной концентрации кадмия в барьерах и КЯ из HgTe можно ожидать почти двухкратного повышения критической температуры стимулированного излучения по сравнению с прототипной структурой с  $Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te/Cd_{0.65}Hg_{0.35}Te$  КЯ.

## 4.5 Перспективные структуры

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



**Пороговая энергия Оже-процессов и толщина КЯ.** Расчеты проводились при  $T = 40\text{ K}$ ,  $E_g \approx 67\text{ meV}$ .

смысле структур может предотвратить возникновение канала оже-рекомбинации типа ССНС 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 суще-

ственное 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 HgCdTe/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 равное  $38\text{ meV}$  для длины волны  $18\text{ }\mu\text{m}$  можно получить в КЯ-мах из «чистого» HgTe и барьерах с составами  $\text{CdyHg}_{1-y}\text{Te}$  от 0.5 до 0.7. Результаты показывают перспективы создание межзонных лазеров на основе гетероструктур с КЯ HgCdTe/CdHgTe в диапазоне длин волн от 14 до 18 работающих при температурах вплоть до 200 К.

# 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  $\mu\text{m}$  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  $\text{A}_4\text{B}_6$  // 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  $\text{pb}_x\text{sn}_{1-x}\text{te}$  // Physical Review Letters. — 1966. — Vol. 16, no. 26. — P. 1193.
- [5] Asryan L. V. Spontaneous radiative recombination and nonradiative auger recombination in quantum-confined heterostructures // Quantum Electronics. — 2005. — Vol. 35, no. 12. — P. 1117.
- [6] Абакумов □., Перель □., Ясиевич □. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках // Изд-во ПИЯФ, СПб. — 1997.
- [7] Исследование пороговой энергии оже-рекомбинации в волноводных структурах с квантовыми ямами  $\text{hgte}/\text{cd}_{0.7}\text{hg}_{0.3}\text{te}$  в области 14 мкм / В.В. Уточкин, В.Я. Алёшкин, А.А. Дубинов et al. — 2019.
- [8] Band structure of semimagnetic  $\text{hg}_{1-y}\text{mn}_y\text{te}$  quantum wells / E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth et al. // Phys. Rev. B. — 2005. — Jul. — Vol. 72. — P. 035321. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.035321>.
- [9] Magnetospectroscopy of two-dimensional  $\text{hgte}$ -based topological insulators around the critical thickness / M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita et al. // Phys. Rev. B. —

2012. — Nov. — Vol. 86. — P. 205420. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.205420>.

- [10] 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.
- [11] Dierckx P. Curve and surface fitting with splines. — Oxford University Press, 1995.
- [12] 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.
- [13] Johnson S. G. The nlopt nonlinear-optimization package. — 2014. — Access mode: <http://github.com/stevengj/nlopt>.
- [14] Влияние особенностей зонного спектра на характеристики стимулированного излучения в узкозонных гетероструктурах с квантовыми ямами на основе hgcde / В.В. Румянцев, Н.С. Куликов, А.М. Кадыков et al. // Физика и техника полупроводников. — 2018. — Vol. 52. — P. 1263.
- [15] Hgcde based quantum well heterostructures for long-wavelength lasers operating in 5-15 thz range / VV Rumyantsev, NS Kulikov, AM Kadykov et al. // Journal of Physics: Conference Series / IOP Publishing. — Vol. 1092. — 2018. — P. 012126.