

**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 узкозонными квантовыми ямами на
основе 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

Нижний Новгород

2019 г.

Оглавление

1	Введение	2
2	Излучательная и безызлучательная рекомбинация	5
2.1	Механизмы рекомбинации в полупроводниках	5
2.2	Порог оже-рекомбинации	7
3	Измерения и методики	9
3.1	Методика исследования фотолюминисценции	9
3.2	Методика исследования фотопроводимости	11
3.3	Исследуемые образцы и экспериментальные данные	13
4	Расчёт пороговой энергии оже-процессов	17
4.1	Метод расчёта	17
4.2	Расчёт порога оже-рекомбинации в гетероструктурах с КЯ на основе HgCdTe	20
4.3	Сравнение теории и эксперимента	22
4.4	Зависимость оже-порога от состава барьера	24
4.5	Перспективные структуры	26
5	Заключение	28

1 | Введение

Одной из наиболее актуальных проблем современной прикладной физики является получение источников когерентного излучения терагерцового (ТГц) 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 (ККЛ). Они демонстрируют превосходные характеристики (высокий КПД, высокий уровень когерентности) в диапазоне 1-5 THz и выше 15 THz [1]. 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 THz со стороны низких частот (относительно частот оптических фононов), но их рабочие характеристики требуют значительного улучшения [2].

Альтернативой ККЛ являются лазеры на основе межзонных переходов в узкозонных полупроводниковых структурах. Такие лазеры намного проще в изготовлении, а также позволяют наблюдать стимулированное излучение и генерацию 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 вероятность межзонной оже-рекомбинации растёт с уменьшением ширины запрещённой зоны, что может затруднить получение стимулированного излучения.

Оже-рекомбинация представляет собой безызлучательный трёхчастичный процесс. По типу носителей заряда, участвующих в процессе он делится на ССНС и ННСН процессы (процесс с участием двух электронов и дырки и процесс с двумя дырками и электроном соответственно). В ходе этого процесса пара носителей с противоположным зарядом рекомбинирует и передаёт энергию и импульс третьему. В силу ограничений, накладываемых законами сохранения энергии и импульса, 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 закон дисперсии для массовых частиц). С другой стороны возможны структуры, в которых энергетический порог таких оже-процессов к нулю (к примеру Дираковский закон дисперсии безмассовых частиц).

Спектральный диапазон 5 - 15 THz к настоящему моменту частично перекрыт лишь диодными лазерами на основе халькогенидов свинца-олова, которые обеспечивают длины волн излучения вплоть до $46.5 \mu m$ [3]. Фактор, который снижает эффективность Оже-рекомбинации в PbSnSe(Te) [1], [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 за-

прещенной зоны является изменение состава.

Существуют альтернативные полупроводниковые системы, которые позволяют приблизиться к дираковскому закону дисперсии, но сохранить конечную ширину запрещенной зоны. Как было показано в многочисленных работах [5], [6], одна из таких систем - гетероструктуры с КЯ на основе $\text{Hg}(\text{Cd})\text{Te}/\text{CdHgTe}$. 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 [7]. 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 ($= 15\text{-}30\ \mu\text{m}$). Было получено стимулированное излучение (СИ) в КРТ структурах с КЯ на длине волны до $20.3\ \mu\text{m}$ [5], в то время как ранее лазерная генерация в HgCdTe была продемонстрирована лишь в коротковолновой области среднего инфракрасного диапазона спектра (на длинах волн $2 - 5\ \mu\text{m}$). Целью настоящей работы было исследование длинноволнового СИ из подобных структур и выявление факторов, определяющих 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 [6]. Рассмотрены способы его повышения за счет изменения толщины и состава квантовых ям, а также состава барьеров.

2 | Излучательная и безызлучательная рекомбинация

2.1 Механизмы рекомбинации в полупроводниках

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.

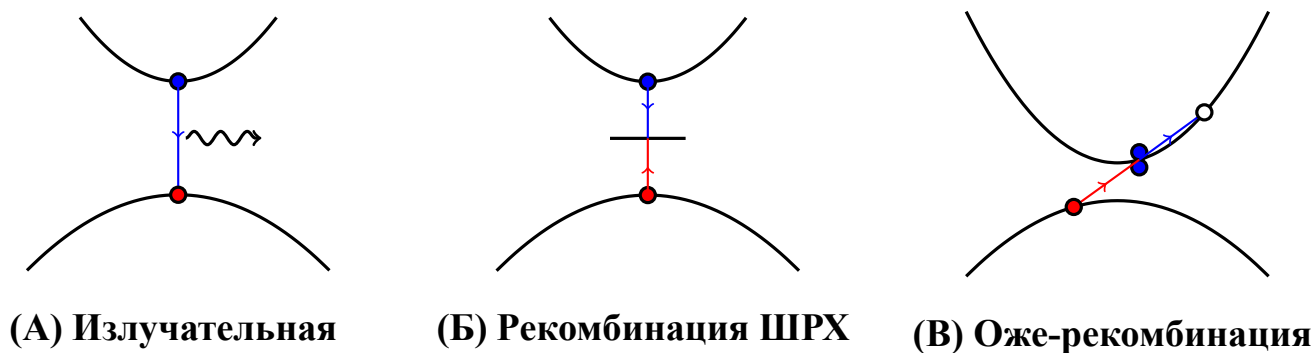


Рис. 2.1: Иллюстрация видов рекомбинации в полупроводниках

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; Δ - величина спин-орбитального расщепления; P^2 - коэффициент Кейна) [8]:

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

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

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 ε_g , а потому излучательная рекомбинация зачастую оказывается имеющей вероятность, сравнимую с вероятностью безызлучательной рекомбинации.

Однако не менее важным оказывается влияние безызлучательных процессов - они снижают инверсию населённостей, и тем самым конкурируют с излучательной рекомбинацией. При больших длинах волн оказывается, что в силу низких темпов излучательного процесса именно ШРХ- и оже-процессы определяют время жизни носителей заряда 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 достаточно чистых полупроводников. Также требуется добавить, что для такого процесса существует насыщение ввиду конечного числа примесей.

В то же время существует процесс оже-рекомбинации. В подобный процесс вступает 3-и частицы: 2-е одного знака, 1-а - иного. В ходе такого процесса две частицы разных знаков взаимоуничтожаются, отдавая свою энерги и импульс третьей. Таким образом происходит не только уничтожение носителей заряда, но и существенный разогрев оставшихся. Разогретые неравновесные частицы ещё активнее вступают такие процессы.

2.2 Порог оже-рекомбинации

Оже-процесс является пороговым, иначе говоря существует минимальная ”кинетическая” энергия трёх частиц, при которой становятся возможными такие переходы ε_{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 при 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.

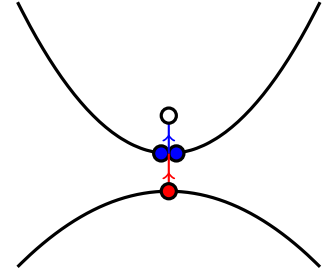


Рис. 2.2: Запрещённый ССНС переход

В наипростейшем случае параболических изотропных дисперсионных соотношений для электронов и дырок [9]. Оказывается, что в таком случае пороговая энергия и импульсы начальных частиц (два электрона в таком случае должны находиться в одном состоянии) равны:

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

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 отношение эффективных масс. Очевидно, что чем больше это отношение $\mu = m_c/m_h$, тем больше будет и порог для этого процесса (однако в таком случае будет превалировать процесс типа ННСН).

Отдельно стоит отметить свойства дираковского закона дисперсии. Оказывается, что для него полностью запрещены оже-переходы [10]. Поэтому одним из

возможных способов повысить порог оже-рекомбинации является создание структур, имеющих близкий к релятивистскому закон дисперсии носителей заряда.

3 | Измерения и методики

3.1 Методика исследования 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 от температуры и внутренней структуры образцов представляет особый интерес. Поэтому основным методом исследования образцов в данной работе является измерение фотолюминисценции.

Исследуемый образец помещается в вакуумный криостат ARS-Cryotech с гелиевым охлаждением и возможностью нагрева образцов до необходимой температуры в пределах 7 - 300 К. 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 возбуждались лазером CO_2 с длиной волны $10.6\text{ }\mu\text{m}$ с мощностью от 100 W до 10 MW в импульсе соответственно и длительностью импульса 100 ns с частотой повторения 5 – 10 Hz.

При этом использовался фурье спектрометр Bruker Vertex V80, в режиме пошагового сканирования. Этот режим позволяет передвигать зеркало спектрометра дискретно, что позволяет существенно подавить сигнал комнатного фона, который обладает высокой интенсивностью в среднем и дальнем инфракрасном диапазоне.

В качестве приемника использовался кремниевый болометр производства IRLabs

с полосой чувствительности в диапазоне $16 - 300 \mu m$. Также некоторые измерения были произведены при помощи полупроводникового детектора на основе МСТ (также производства IRLabs), имеющего полосу чувствительности $4 - 16 \mu m$.

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

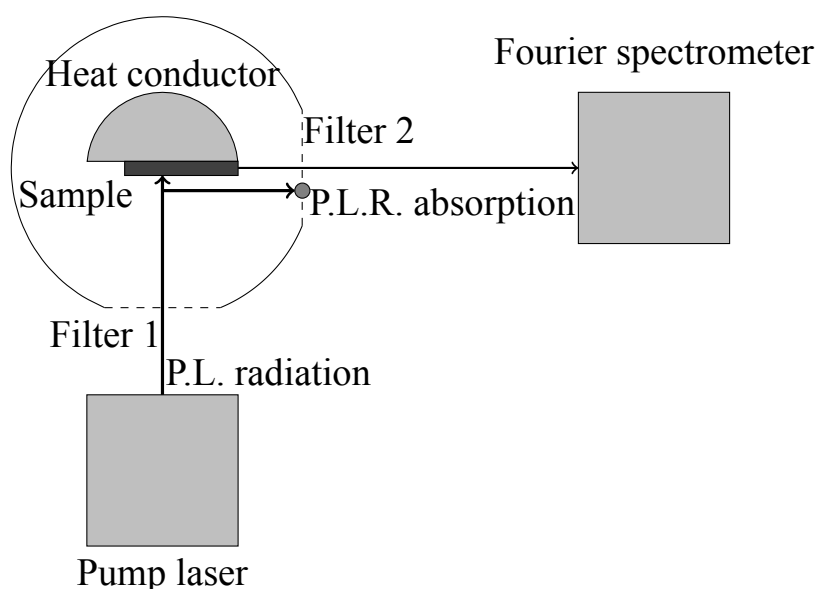


Рис. 3.1: Геометрия задачи исследования фотолюминисценции

Для снижения влияния электромагнитных 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.

Основным программным обеспечением, использованным при обработке спектров, являлся Opus 7.0. В частности это позволяет записывать временно-разрешённые

спектры, а также в существенной мере отфильтровать шумы посредством правильной обработки интерферограммы.

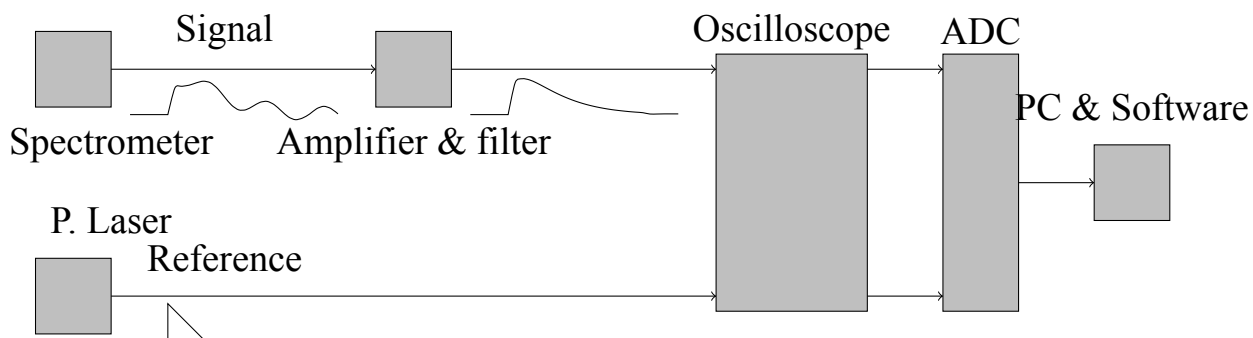


Рис. 3.2: Принципиальная схема эксперимента фотолюминисценции

3.2 Методика исследования фотопроводимости

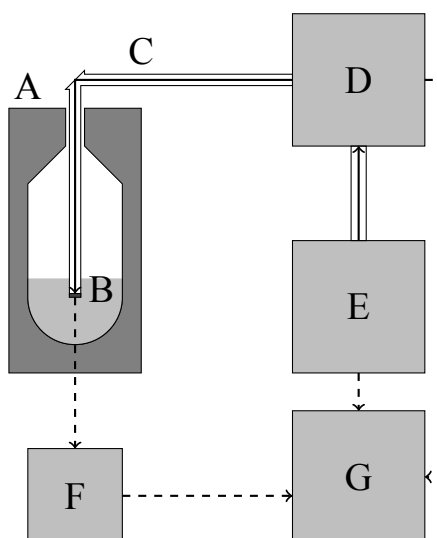


Рис. 3.3: Принципиальная схема измерения фотопроводимости

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

Для характеристики исследуемых образцов использовалась методика измерения 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 специфи-

ки образцов мы можем считать их сопротивление линейным, поэтому полученный в результате измерений, сигнал не нуждается в дополнительной обработке.

3.3 Исследуемые образцы и экспериментальные данные

Все образцы были выращены на поверхности GaAs подложки с плоскостью роста [013] посредством молекулярно - лучевой эпитаксии в ИФП СО РАН [7]. Такое направление было выбрано в силу технологических причин (более высокая скорость роста структуры). Обязательным условием возможности создания таких структур является буфер CdTe между подложкой и участком с квантовыми ямами, обеспечивающий согласование периодов решётки кристалла, а также нивелирующий до некоторой степени разность в коэффициентах термического расширения материалов. 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 состава, 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: $\tau_p \gg \tau_\epsilon$. 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 нассе-

ленностей 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 вблизи квантовых ям. Это позволяет существенно увеличить матричный элемент перехода с нижнего энергетического уровня на первый возбужденный.

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

Первым примером будет образец из работы [11]. Рассматривался образец, содержащий 10 несвязанных туннельно (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 запрещенной 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.

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

Ширина запрещенной зоны была подтверждена методом фотопроводимости. Это позволило удостовериться в правильности последующих расчетов и подтвер-

дить наблюдение именно межзонной фотолюминисценции.

В ходе измерения были получены спектры фотолюминисценции, приведённые ниже 3.4, 3.5.

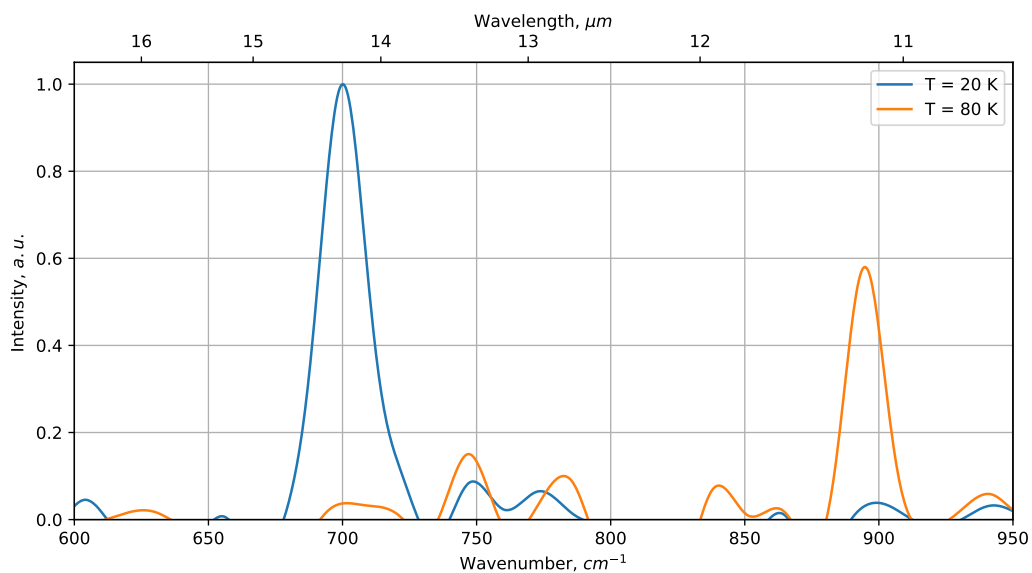


Рис. 3.4: Спектры стимулированного излучения для структуры, рассчитанной на длину волны $14 \mu m$.

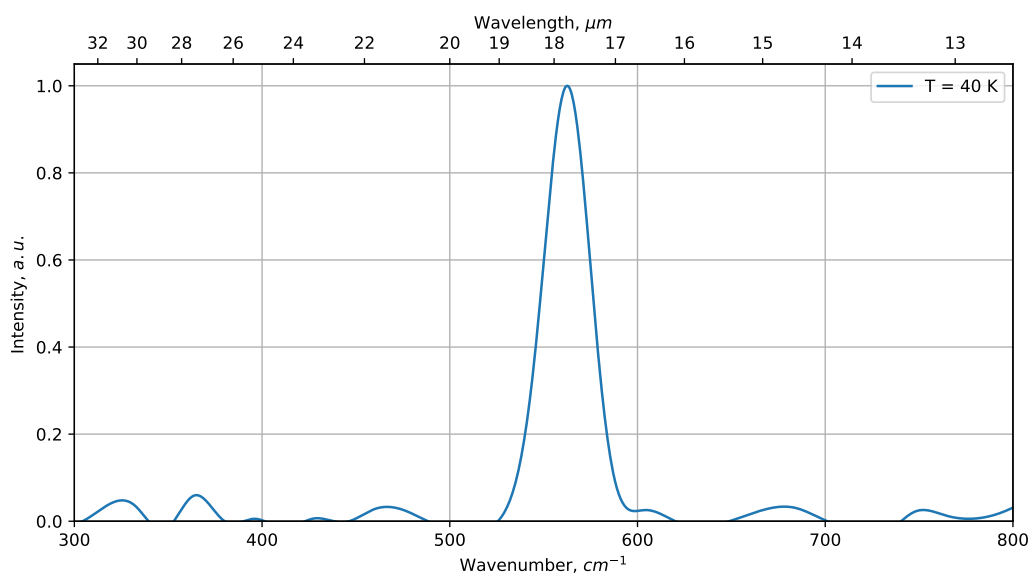


Рис. 3.5: Спектр стимулированного излучения для структуры, рассчитанной на длину волны $18 \mu m$.

Как можно видеть, при изменении температуры происходит сдвиг излучения в более коротковолновую область, а также снижение интенсивности стимулированного излучения. Отчасти это может быть объяснено тем, что длина волны становится нерезонансной для внутренней волноводной структуры за счёт изменения ширины запрещённой зоны. 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 больший интерес 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 населённость состояний с более высокой энергией, что, напротив, стимулирует оже-рекомбинацию.

Отсюда возникает задача расчёта порога оже-рекомбинации и его сравнения с тепловой энергией частиц, которые смогут характеризовать это снижение интенсивности и температуру гашения СИ в целом.

4 | Расчёт пороговой энергии оже-процессов

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 \vec{k} , характеризующим движение в плоскости ямы. 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 данной 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** ε_{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 α равно 0 для электронов и 1 для дырок, если мы выбираем за начало отсчёта энергии дно зоны проводимости $E_c = 0$, $E_v = -\varepsilon_g$ (в дальнейшем будет рассматриваться именно такая постановка задачи).

Попробуем формализовать задачу отыскания оже-процесса с наименьшей энергией. 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 ε_g , что соответствует получению энергии от рекомбинации. Аналогично, и для ННСН процесса, однако при выбранном способе отсчёта энергии из полной конечной энергии потребуется вычитать уже $2\varepsilon_g$ - один за счет энергии от рекомбинации, второй - из за того, что $E_v = -\varepsilon_g$.

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

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

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):

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

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 $\varepsilon \left(\left| \vec{k} \right| \right)$. 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 оже-рекомбинации в гетероструктурах с КЯ на основе 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. Буфер 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 [12]. 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 [13].

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 [14], которые при той же гладкости имеют отличные граничные условия и не приводят к подобным ошибкам. Для работы со сплайнами применялся математический пакет Dierckx [15] 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 [16] в математическом пакете NLOpt [17]. 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, для 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 условия 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 тяжёлых дырок могут иметь боковые максимумы. Эти боковые максимумы имеют потолки, лишь немного уступающие по энергии гамма-точке $E_v - E_s \leq \varepsilon_g$. Для нас это имеет следующие последствия:

- боковые максимумы оказываются заселёнными;
- боковые максимумы не участвуют в процессе излучательной рекомбинации;
- боковые максимумы позволяют частицам иметь большой импульс.

Из этого видно, что подобные побочные максимумы могут существенно сни-

жать 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 разность энергии в гамма точке для легких и тяжёлых дырок меньше или равной ширине запрещённой зоны, что позволяет при перестройке температуры наблюдать беспороговые резонансные оже-процессы. Также в силу возможного наличия боковых максимумов имеется большая вероятность подобрать точки с равными групповыми скоростями.

4.3 Сравнение теории и эксперимента

В ходе многочисленных экспериментов была получена эмпирическая формула, связывающая порог оже-процессов и максимальную температуру, при которой наблюдается стимулированное излучение [18]:

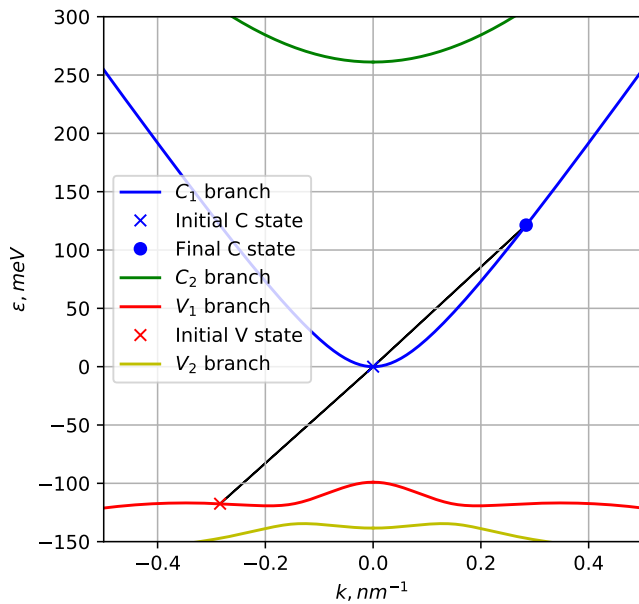
$$T_{max} \approx \varepsilon_{th}/2; \quad (4.5)$$

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 [19]. Особое внимание стоит уделить в данном случае заполненности валентной зоны, поскольку, как было оговорено выше, чаще всего именно дырки обуславливают энергию 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.

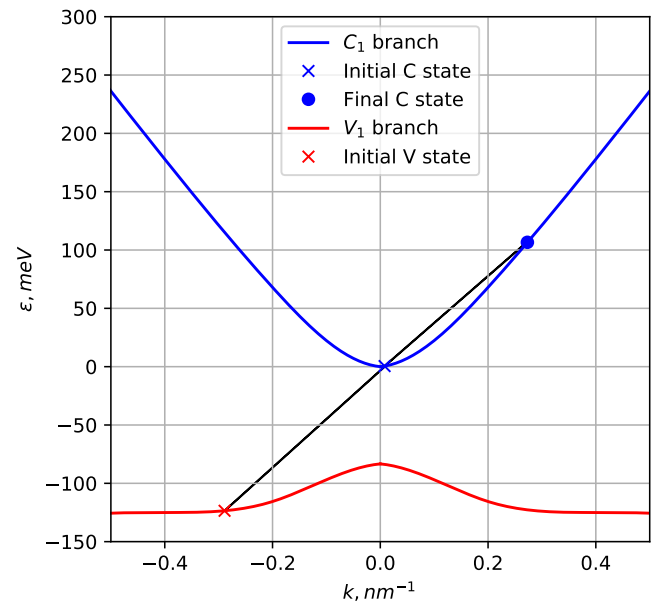
Результаты расчётов спектра электронов и дырок для двух случаев приведены на рисунке. В первом случае (рис. а) расчёт проведён для экспериментально исследованной $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}/\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$ КЯ толщиной 7.4 nm, во втором случае (рис. б) расчёт проведён для $\text{HgTe}/\text{Cd}_{0.65}\text{Hg}_{0.35}\text{Te}$ КЯ толщиной 4.3 nm. В обоих случаях ширина запрещённой зоны составляет при 80 K порядка 83 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 [5].



(А) Образец с "грязными" КЯ.

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



(Б) Образец с "чистыми" КЯ.

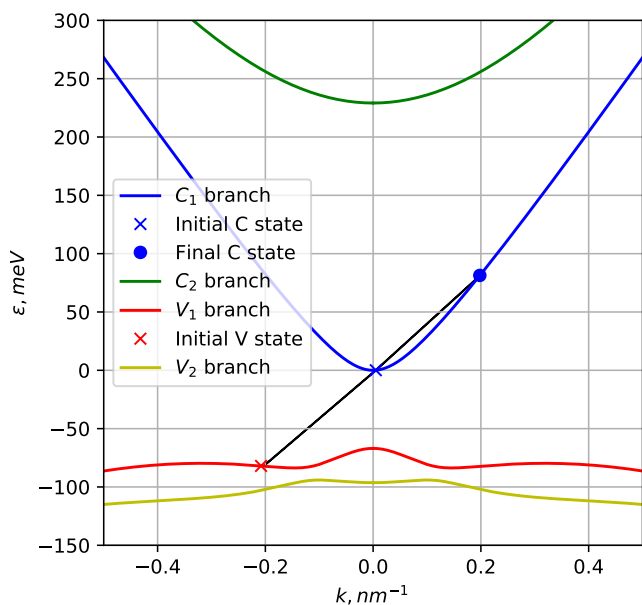
Пороговая энергия $\varepsilon_{th} \approx 23.3 \text{ meV}$.

Рис. 4.1: Расчёты дисперсионных соотношений и порогового оже-процесса для структуры, рассчитанной на длину волны $14 \mu\text{m}$

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

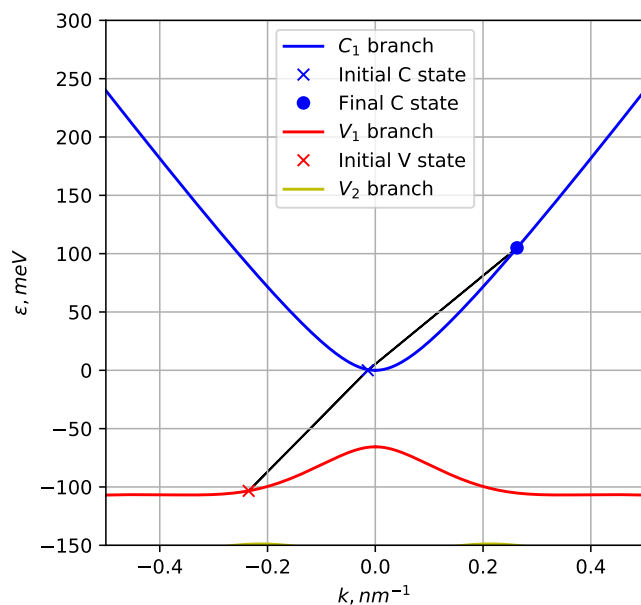
Из рисунка а видно, что для первого случая в валентных подзонах имеются дополнительные максимумы, располагающиеся ниже потолка валентной зоны на 7

meV. В 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.



(В) Образец с "грязными" КЯ.

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



(Г) Образец с "чистыми" КЯ.

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

Рис. 4.2: Расчёты дисперсионных соотношений и порогового оже-процесса для структуры, рассчитанной на длину волны $18 \mu\text{m}$

4.4 Зависимость оже-порога от состава барьера

Помимо состава и толщины ямы существенное влияние на зонную структуру и, как следствие, на порог оже-процессов может оказывать состав барьеров. Рассмотрим подробнее структуру для излучения на длине волны $18 \mu\text{m}$, 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 40 K, 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 около 0.3.

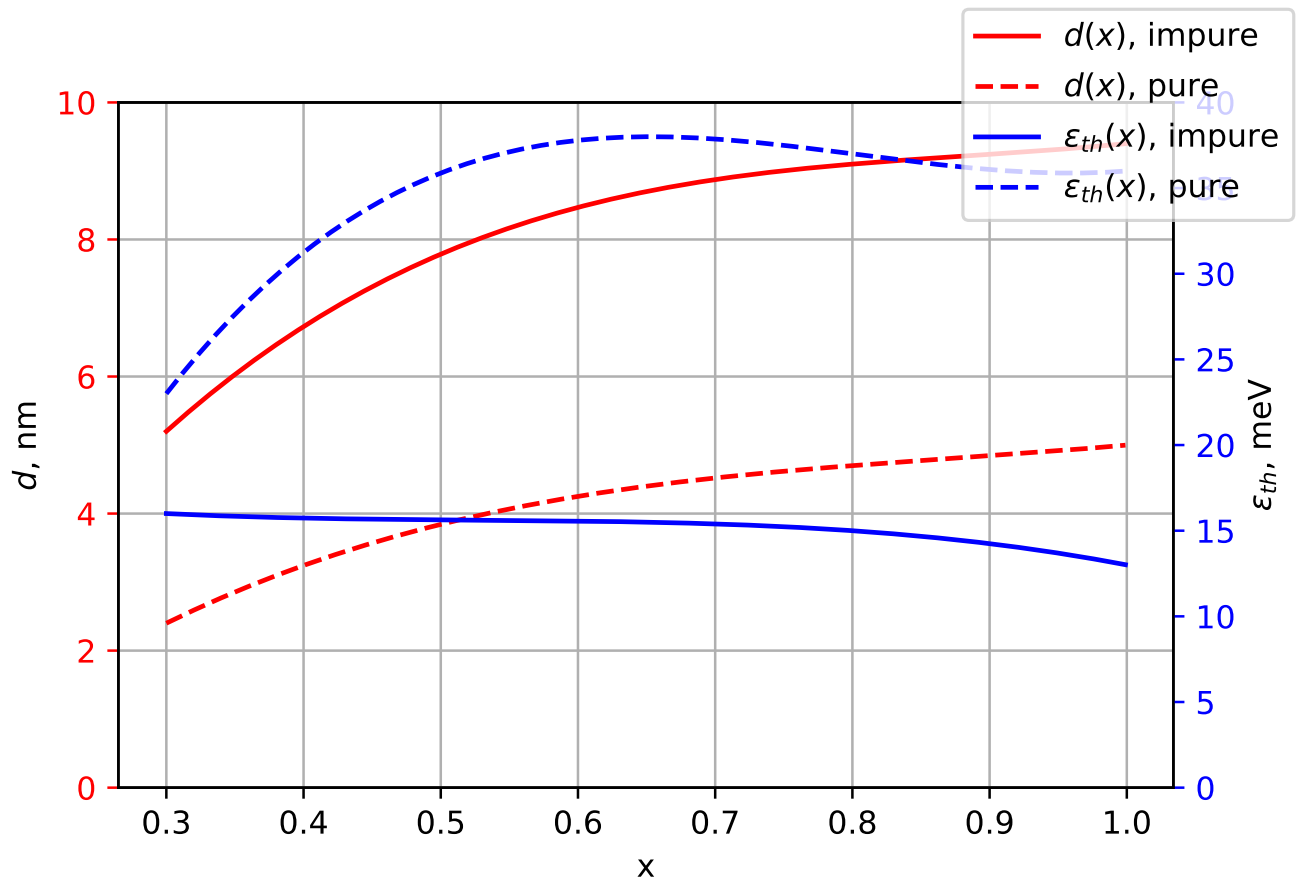


Рис. 4.3: Пороговая энергия Оже-процессов и толщина КЯ.

Расчеты проводились при $T = 40\text{ K}$, $E_g \approx 67\text{ meV}$.

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 $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}$ квантовой яме. Это связано с наличием в $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}$ квантовой яме ярко выраженного бокового экстремума в верхней валентной подзоне 4.3. 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 двухкратного 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.

4.5 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 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 рассмотрение лишь радиальной составляющей дисперсионного соотношения будет давать существенную ошибку ε_{th} , 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 концентрацию 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). Также стоит отметить возможность создания приборов на основе $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$, использующих примесные состояния [20].

5 | Заключение

В данной работе для волноводных гетероструктур с КЯ $\text{HgCdTe}/\text{CdHgTe}$ излучающих в области длин волн $14\text{--}18\ \mu\text{m}$ были проведены оценки минимальной энергии оже-рекомбинации для различных параметров материала и толщин КЯ-м и составов барьерных слоев. Обнаружено, что максимальное значение пороговой энергии оже-рекомбинации равно $38\ \text{meV}$ для длины волны $18\ \mu\text{m}$ можно получить в квантовых ямах из «чистого» HgTe и барьерах с составами $\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ от 0.5 до 0.7. Результаты численных расчётов показывают перспективы создания межзонных лазеров на основе гетероструктур с КЯ $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ в диапазоне длин волн от 14 до 18 работающих при температурах вплоть до 200 К.

Литература

- [1] Засавицкий □. Инфракрасная люминесценция и характеристики энергетического спектра полупроводников типа А4В6 // Труды ФИАН. Оптические и электрические свойства полупроводников. — 1993. — Vol. 224. — P. 3–118.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [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] Hgcdte 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.
- [6] Carrier recombination, long-wavelength photoluminescence, and stimulated emission in hgcdte quantum well heterostructures / Vladimir Rumyantsev, Mikhail Fadeev, Vladimir Aleshkin et al. // physica status solidi (b). — 2019. — P. 1800546.
- [7] Hgcdte epilayers on gaas: growth and devices / Vasily S Varavin, VV Vasiliev,

Sergey A Dvoretzky et al. // Solid State Crystals 2002: Crystalline Materials for Optoelectronics / International Society for Optics and Photonics. — Vol. 5136. — 2003. — P. 381–396.

- [8] Asryan L. V. Spontaneous radiative recombination and nonradiative auger recombination in quantum-confined heterostructures // Quantum Electronics. — 2005. — Vol. 35, no. 12. — P. 1117.
- [9] Абакумов □., Перель □., Ясиевич □. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках // Изд-во ПИЯФ, СПб. — 1997.
- [10] Vasko F. T., Raichev O. E. Quantum Kinetic Theory and Applications: Electrons, Photons, Phonons. — Springer Science & Business Media, 2006.
- [11] 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, Н.С. Куликов et al. // Физика и техника полупроводников. — 2019.
- [12] 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>.
- [13] Magnetospectroscopy of two-dimensional 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>.
- [14] 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.
- [15] Dierckx P. Curve and surface fitting with splines. — Oxford University Press, 1995.

- [16] 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.
- [17] Johnson S. G. The nlopt nonlinear-optimization package. — 2014. — Access mode: <http://github.com/stevengj/nlopt>.
- [18] 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.
- [19] Auger recombination in dirac materials: A tangle of many-body effects / Georgy Alymov, Vladimir Vyurkov, Victor Ryzhii et al. // Phys. Rev. B. — 2018. — May. — Vol. 97. — P. 205411. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.205411>.
- [20] Особенности фотолюминесценции двойных акцепторов в гетероструктурах hgte/Cdhgte с квантовыми ямами в терагерцовом диапазоне / Дмитрий Владимирович Козлов, В В Румянцев, Н С Куликов et al. // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2019. — Vol. 109, no. 10. — P. 679–684.