МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА КЯ $CdTe/Hg_{1-x}Cd_xTe/CdTe$ ПРИ ВАРЬИРОВАНИИ ВЕЛИЧИНЫ РАЗРЫВА ЗОН, ШИРИНЫ ЯМЫ И СОСТАВА x

Е. А. Мележик, Ж. В. Гуменюк-Сычевская

Гетероструктуры $CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te/CdTe$ сегодня привлекают большой интерес и являются весьма перспективными для разработки детекторов терагерцового излучения нового поколения. Однако свойства таких структур на сегодня в литературе изучены недостаточно. В работе проведено теоретическое моделирование энергетического спектра и волновых функций гетероструктуры $CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te/CdTe$ для различных значений ширины ямы, разрыва валентных зон и состава x в диапазоне $0 < x < 0.16$. Изучены характерные особенности поведения энергетических уровней двумерных электронов в таких структурах при изменении x. Получен критерий для определения количества электронных уровней ниже дна зоны проводимости, применимый для составов $0 < x < 0.16$. Проведены расчеты времени релаксации двумерных электронов на продольных оптических фононах.

Ключевые слова: гетероструктуры, квантовые ямы, двумерные электроны.

Сегодня исследованию ТГц-излучения и методов его детектирования уделяется значительное внимание. ТГц-детекторы могут быть использованы во многих областях, начиная от изучения космоса и до медицины. Одними из наиболее перспективных материалов для создания таких детекторов считаются гетероструктуры $CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te/CdTe$. В диапазоне значений состава $0 < x < 0.16$, материал $Cd_xHg_{1-x}Te$ обладает инвертированной зонной структурой и узкой запрещенной зоной по сравнению с широкозонным CdTe. Такие параметры $Cd_xHg_{1-x}Te$ позволяют получать высокую подвижность локализованных в яме электронов, что открывает широкие

Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарева НАНУ, Украина, Киев, 03028, пр. Науки, 41. e-mail: emelezhik@gmail.com

возможности к созданию детекторов ТГц-диапазона с более высокой чувствительностью.

Однако свойства таких материалов в литературе на сегодня исследованы достаточно слабо. Так, существует множество экспериментальных значений для величины разрыва валентных зон Δ на гетероинтерфейсе CdTe/CdHgTe, которые варьируются от 40 и 80 до 350 и 550 мэВ [1, 2]. Другими недостаточно исследованными на сегодня аспектами являются свойства $Cd_xHg_{1-x}Te$ при ненулевых значениях $0 < x < 0.16$. Однако именно при таких составах реализуется наименьшая эффективная масса электронов и их максимальная подвижность.

Поэтому целью данной работы является теоретическое моделирование энергетических спектров и волновых функций электронов в квантовой яме (КЯ) $CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te/CdTe$ и установление их характерных особенностей при различных значениях ширины ямы L, разрыва валентных зон Δ и состава x.

В ходе работы нами были получены следующие результаты.

Волновые функции имеют пик на гетероинтерфейсах. При $x = 0$ волновые функции электронов двух нижних уровней локализованы на интерфейсах и быстро затухают внутри ямы. С увеличением номера уровня волновая функция больше осциллирует внутри ямы, что оттягивает туда вероятность найти электрон.

Установлено, что изменение состава x в диапазоне $0 < x < 0.16$, позволяет изменить область локализации электронов на двух нижних уровнях КЯ. Так, при $x = 0$ волновые функции электронов имеют пики на гетероинтерфейсах и быстро затухают внутри ямы. При увеличении x вероятность найти электрон ближе к центру ямы увеличивается. Это приводит к изменению механизма рассеяния таких электронов. Если в первом случае доминирующим механизмом было рассеяние на неровностях гетероинтерфейсов, то при увеличении x роль интерфейсного рассеяния нивелируется, и доминирующим становится рассеяние внутри квантовой ямы. В частности, при азотных температурах – рассеяние на продольных оптических фононах. Таким образом, для таких составов x возможен расчет времен релаксации и подвижностей электронов без учета интерфейсных механизмов релаксации, включающих в себя подгоночные экспериментальные параметры. Важность данного результата состоит в том, что именно гетероструктуры с большими x являются наиболее перспективными.

При постоянных x и Δ и изменении L энергия основного уровня меняется слабо по сравнению с более высокими. С другой стороны, энергия первого уровня при изменении величины Δ изменяется приблизительно линейно. Таким образом, расстояние между

основным уровнем и дном зоны проводимости ямы определяется преимущественно величиной разрыва валентных зон. При постоянных x и L изменение Δ сильнее всего влияет на энергии первых двух уровней.

Также отметим появление в зависимости спектра от ширины ямы такого эффекта, как "слипание" первого и второго энергетических уровней при увеличении ширины ямы. Интересно отметить, что хотя разница в энергиях между этими уровнями может быть очень мала, тем не менее им соответствуют две различные волновые функции.

Установлено, что увеличение x от 0 к 0.16 приводит к существенному изменению положений всех энергетических уровней электрона в яме. Интересно, что такое увеличение x при неизменном Δ приводит к увеличению расстояния между основным и первым возбужденными уровнями, что существенно повлияет на времена релаксации локализованных электронов в такой гетероструктуре по сравнению со случаем $x = 0$.

При ненулевых значениях Δ один или два уровня будут находиться ниже дна зоны проводимости ямы. В работе получен критерий для определения количества таких уровней. Он определяет, что ниже дна зоны будут находиться два уровня в том случае, если ширина ямы L удовлетворяет условию:

$$L > \sqrt{\frac{8P^2(E_a(x,T) + V_s)}{3E_a(x,T)^2 \cdot \Delta}},$$

где $E_a(x,T)$ – ширина запрещенной зоны $Cd_xHg_{1-x}Te$, Δ – разрыв зон Г8 барьера и ямы, V_s – разрыв зон Г6 барьера и ямы, а $P = 8.3 \cdot 10^{-8}$ эВ·см – оптический матричный элемент.

Критерий применим для КЯ рассматриваемого типа с любым составом x из диапазона $0 < x < 0.16$, и позволяет определить количество таких уровней, исходя из состава, ширины ямы и разрыва валентных зон. Отметим, что данный критерий коррелирует с более ранними результатами других авторов [2], полученных для квантовой ямы CdTe/HgTe/CdTe:

$$L > \frac{2|m_B|}{m_A}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2|m_B| \cdot \Delta}},$$

где m_A и m_B – эффективные массы в зоне проводимости ямы и барьера соответственно. В частности, ширина ямы, при которой второй уровень пересекает дно зоны проводимости ямы, обратно пропорциональна корню из разрыва валентных зон.

Также получены предварительные результаты для расчета времени релаксации двумерных электронов на продольных оптических фононах. Эти времена составляют порядка $10^{-10} - 10^{-11}$ сек.

ЛИТЕРАТУРА

[1] P. M. Hui, H. Ehrenreich, N. F. Johnson, Vac. Sci. Technol. A **7**(2), (1989).

[2] M. von Truchsess, V. Latussek, C. R. Becker, E. Batke, J. Cryst. Growth. **159**, 1128 (1996).

[3] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Halsted Press, New York, 1988).

По материалам 3 Всероссийской молодежной школы-семинара "Инновационные аспекты фундаментальных исследований по актуальным проблемам физики", Москва, ФИАН, октябрь 2009 г.

Поступила в редакцию 3 ноября 2009 г.