

ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК НА СОСТОЯНИЯ ВАКАНСИЙ РТУТИ С ИСПУСКАНИЕМ ОДИНОЧНОГО ОПТИЧЕСКОГО ФОНОНА ПРИ РЕКОМБИНАЦИИ ШОКЛИ – РИДА – ХОЛЛА В УЗКОЗОННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ HgCdTe

Д. В. Козлов ^{a,b}, В. В. Румянцев ^{a,b}, А. А. Янцер ^{a,b*}, С. В. Морозов ^{a,b}, В. И. Гавриленко ^{a,b}

^a Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия

^b Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
603950, Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 6 ноября 2023 г.,
после переработки 16 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

Расчитано время рекомбинации Шокли – Рида – Холла (ШРХ) при захвате носителей заряда на состояния вакансии ртути в твердых растворах HgCdTe с шириной запрещенной зоны около 40 мэВ. В рассматриваемом случае захват как электрона, так и дырки возможен за счет испускания одного оптического фонона. Установлено, что при $T = 4.2$ и 77 К рекомбинация ШРХ определяет общее время жизни носителей в материале p -типа при концентрации центров рекомбинации более $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, что позволяет управлять временем жизни носителей за счет изменения концентрации вакансий ртути.

DOI: 10.31857/S0044451024060117

1. ВВЕДЕНИЕ

На протяжении нескольких десятилетий HgCdTe остается одним из основных материалов для детектирования инфракрасного излучения [1]. Диапазон доступных длин волн для коммерческих межзонных фотодетекторов на основе HgCdTe простирается от ближнего ИК-диапазона приблизительно до 25 мкм, что обусловлено широкими возможностями по варьированию ширины запрещенной зоны твердого раствора. Поскольку HgTe имеет фактически нулевую ширину запрещенной зоны, в приемниках на основе растворов HgCdTe с высоким содержанием Hg в принципе достижимы рабочие длины волн более 25 мкм. Однако на пути к дальнему ИК-диапазону возникает ряд препятствий. Помимо технологических сложностей, таких как флуктуации состава или проблемы с легированием p -типа для фотодиодов, существуют фундаментальные ограничения на детектирующую способность материала, связанные с временем жизни носителей. С умень-

шением ширины запрещенной зоны ускорение процессов безызлучательной рекомбинации приводит к уменьшению времени жизни носителей и соответствующему снижению чувствительности. Несмотря на то, что эта тема интенсивно исследовалась на протяжении нескольких десятилетий, до сих пор остаются некоторые количественные неопределенности, в частности, в отношении оже-рекомбинации [2]. Другой тип безызлучательных процессов — рекомбинация Шокли – Рида – Холла (ШРХ) связан с дефектными/примесными центрами, которые всегда присутствуют в HgCdTe по крайней мере за счет вакансий ртути. В HgCdTe формирование вакансий фактически неизбежно из-за слабой связи Hg–Te, при этом их энергетический спектр все еще является предметом дискуссий [3–5]. Увеличение концентрации вакансий ртути путем постростового отжига часто используется для конверсии типа проводимости пленок HgCdTe из электронного в дырочный. Времена жизни носителей при конверсии, как правило, значительно уменьшаются [6] предположительно из-за того, что возникающие вакансии ртути служат дополнительными центрами рекомбинации. С другой стороны, малые времена жизни носителей

* E-mail: yantser@ipmras.ru

позволяют создавать быстродействующие приемники ИК-излучения, в том числе гетеродинного типа. Гетеродинные приемники и смесители в длинноволновой части среднего ИК могут быть интересны для спектроскопии в астрофизике. В частности, изучение спектров эмиссии космических объектов, таких как туманности, на характеристических линиях водорода (28.221 мкм, 17.035 мкм, 12.279 мкм, 9.665 мкм, 8.026 мкм) позволяет визуализировать нагрев и остывание таких объектов, как ударные волны и столкновения, и другие эффекты [7].

Вакансия ртути является двухзарядным или двойным акцептором. Такой акцептор может находиться в трех зарядовых состояниях: нейтральный A_2^0 -центр, с которым связаны две дырки, однократно ионизованный A_2^{-1} -центр, с которым связана одна дырка, и, наконец, полностью ионизованный A_2^{-2} -центр. Из-за большого количества исследований разброс известных из литературы энергий ионизации для A_2^0 -центра и A_2^{-1} -центра весьма велик. Однако наличие состояний, отстоящих от края валентной зоны на 15–20 мэВ, установлено достаточно надежно [8–11]. Отметим, что сложность в однозначном определении энергии ионизации в данном случае связана еще и с тем, что она перекрывается с энергией оптических фононов, которые в твердом растворе представлены HgTe-подобными и CdTe-подобными модами с энергиями от 15 до 17.5 мэВ и от 16 до 20 мэВ соответственно. Таким образом, если ширина запрещенной зоны в материале составляет от 30 до 40 мэВ (при доле Cd в твердом растворе 18.8%), можно ожидать, что дискретный уровень дефекта оказывается вблизи середины запрещенной зоны. В процессе рекомбинации ШРХ через вакансии ртути возможны следующие каналы рекомбинации:

- Через нейтральные вакансии (A_2^0 -центры). Электрон захватывается на нейтральный центр, образуется A_2^{-1} -центр. Затем на этот центр захватывается дырка (процесс 1: $A_2^0 + e = A_2^{-1}$, $A_2^{-1} + h = A_2^0$).
- Через A_2^{-1} -центр. Либо дырка захватывается на A_2^{-1} -центр с образованием нейтральной вакансии, а затем на нее захватывается электрон (процесс 2: $A_2^{-1} + h = A_2^0$, $A_2^0 + e = A_2^{-1}$). Либо электрон захватывается на A_2^{-1} -центр с образованием A_2^{-2} -центра, а затем на этот центр захватывается дырка (процесс 3: $A_2^{-1} + e = A_2^{-2}$, $A_2^{-2} + h = A_2^{-1}$).

- Через A_2^{-2} -центр. Дырка захватывается на полностью ионизованную вакансию с образованием A_2^{-1} -центра, затем на этот центр захватывается электрон (процесс 4: $A_2^{-2} + h = A_2^{-1}$, $A_2^{-1} + e = A_2^{-2}$).

Безызлучательный захват как дырки, так и электрона происходит с испусканием оптических и акустических фононов. При всех таких процессах должен выполняться закон сохранения энергии: разность между энергией состояния континуума и энергией состояния примесно-дефектного центра должна быть равна энергии фонона. В настоящей работе мы сосредоточимся на рассмотрении процессов рекомбинации ШРХ в материале с шириной запрещенной зоны от 35 до 40 мэВ. Соответствующий данным энергиям диапазон длин волн (от 30 до 35 мкм) представляется следующим естественным «рубежом» для продвижения приемников на основе HgCdTe в длинноволновую область. В качестве центра рекомбинации будет рассмотрен A_2^{-1} -центр с энергией ионизации 20 мэВ, обнаруженный ранее в серии работ по исследованию эпитаксиальных слоев HgCdTe, выращенных методом МЛЭ [12, 13]. Таким образом, в рассматриваемом случае захват как дырки, так и электрона на состояние может происходить с испусканием одного оптического фонона. Сравнение результатов расчетов с характерными временами для других процессов рекомбинации (ожерекомбинация и излучательная рекомбинация) показывает, что рассматриваемый тип рекомбинации ШРХ может быть доминирующим каналом релаксации неравновесной концентрации носителей как при температуре жидкого гелия, так и при температуре жидкого азота.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Ниже будут рассчитаны времена захвата дырок на состояния A_2^{-2} -центра и времена захвата электронов на A_2^{-1} -центр с испусканием одиночных оптических фононов (процессы 3, 4). В первом случае носитель должен потерять энергию равную энергии ионизации A_2^{-1} -центра (E_2), во втором случае передаваемая фонону электроном энергия равна $E_g - E_2$, где E_g — ширина запрещенной зоны. Как уже отмечалось, энергия связи A_2^{-1} -центра в узкозонных (до 50 мэВ) слоях HgCdTe составляет около 20 мэВ, а ширина запрещенной зоны быстро меняется в зависимости от состава твердого раствора. В случае испускания оптического фонона будем использовать золотое правило Ферми для расчета интенсивности

переходов носителей из валентной зоны и зоны проводимости на основное состояние A_2^{-1} -центра вакансии ртути. Из-за колебаний решетки вводится поправка к потенциалу кристалла (δV), которую можно разложить на две составляющие: электростатическое макрполе ($\delta\bar{V}$) и деформационное поле ($\delta\tilde{V}$): $\delta V = \delta\tilde{V} + \delta\bar{V}$ [14]. Макрполе возникает только в полярных полупроводниках, так как из-за смещения атомов решетки возникает поляризация. В полярных полупроводниках носители взаимодействуют с макрполем гораздо сильнее, чем с деформационным потенциалом [14], поэтому в дальнейших расчетах будет учитываться только рассеяние на макрполе (ПО-механизм).

Как известно из [14], вероятность испускания поперечного оптического фонона в этом случае равна нулю. Если же рассматривать вероятность испускания продольного фонона в единицу времени в случае перехода дырки из валентной зоны или электрона из зоны проводимости на основное состояние акцептора A_2^{-1} -центра, то она имеет вид [14]

$$W_{if} = \int \left(\frac{16\pi^3 a^3}{\mu\omega_{LO}(q)} \right) \frac{e^2 \gamma^2}{q^2} |\langle \Psi_{cont} | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \Psi_0 \rangle|^2 \times (N_{\Phi}(q) + 1) \delta(\varepsilon_{cont} - \hbar\omega_{LO}(q) - \varepsilon_0) d^3\mathbf{q}, \quad (1)$$

где i и f — начальное и конечное состояние соответственно, $N_{\Phi}(q)$ — числа заполнения фононных состояний, $\mu = m_{Hg}m_{Te}/(m_{Hg} + m_{Te})$ — приведенная масса атомов элементарной ячейки (атомов теллура и ртути), \mathbf{q} — волновой вектор фонона, ω_{LO} — частота продольного оптического фонона (HgTe-подобного или CdTe-подобного), a — постоянная решетки твердого раствора $Hg_{1-x}Cd_xTe$, $\Psi_{cont,0}$, $\varepsilon_{cont,0}$ — волновые функции и энергии состояний непрерывного спектра и основного локализованного акцепторного уровня (A_2^{-2} -центра вакансии ртути). Согласно [14], значение коэффициента γ для продольных оптических фононов представлено как

$$\gamma = \sqrt{\frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{\kappa_{\infty}} - \frac{1}{\kappa_0} \right) \frac{\mu}{a^3} \omega_{LO}(0)}, \quad (2)$$

где $\kappa_{\infty,0}$ — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости твердого раствора HgCdTe соответственно, $\omega_{LO}(0)$ — частота продольного оптического фонона при $q = 0$. Значения для HgTe и CdTe из [15] использовались, чтобы получить значения диэлектрических проницаемостей для твердого раствора методом линейной интерполяции. Согласно [16], $\omega_{LO}(0) = 4.85 \cdot 10^{12}$ Гц и $4.24 \cdot 10^{12}$ Гц для CdTe-подобного и HgTe-подобного

фононов соответственно. Энергии и огибающие волновых функций дырок были получены решением уравнения Шредингера, которое включало в себя гамильтониан Кейна, потенциал иона акцептора и потенциал центральной ячейки, описывающий химический сдвиг. Данный метод подробно описан в [13]. Волновые функции состояний дырок непрерывного спектра рассчитывались вне борновского приближения с учетом потенциала примесного центра [13], а волновые функции электронов в зоне проводимости выбирались в виде плоских волн.

Интегрируя выражение (1) по состояниям непрерывного спектра в валентной зоне/зоне проводимости с учетом функции распределения дырок/электронов, можно получить частоту захвата частицы (обратное время захвата) из непрерывного спектра:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{cont} W_{cont \rightarrow f} f_{p,n}. \quad (3)$$

В работе [17] показано, что время жизни пьезоакустического рассеяния электронов в зоне проводимости в слоях HgCdTe составляет доли пикосекунд. Поэтому функции распределения $f_{p,n}$ можно считать квазиравновесными:

$$f_{p,n} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_{cont} - F_{p,n}}{T}\right)}, \quad (4)$$

где $F_{p,n}$ — квазиуровень Ферми для дырок и электронов соответственно, ε_{cont} — энергия частицы в континууме зоны проводимости или валентной зоны.

Положение квазиуровня Ферми для дырок находится в зависимости от концентрации дырок в валентной зоне и температуры согласно выражению [18]

$$p = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \left(1 + \exp\left(\frac{-E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} + F_p}{T}\right) \right)^{-1} d^3\mathbf{k} + \frac{2}{(2\pi)^3} \int \left(1 + \exp\left(\frac{-E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} + F_p}{T}\right) \right)^{-1} d^3\mathbf{k}. \quad (5)$$

Здесь m_{hh} и m_{lh} — эффективные массы тяжелых и легких дырок в твердом растворе HgCdTe соответственно, E_V — энергия потолка валентной зоны, T — температура в энергетических единицах. Отметим, что масса легких дырок на порядок меньше массы тяжелых дырок, поэтому второе слагаемое в выражении (2) оказывается много меньше первого и им

можно пренебречь. Рассчитанное положение уровня Ферми было использовано при расчете частоты захвата дырок из валентной зоны согласно выражению (3).

Положение квазиуровня Ферми для электронов находится в зависимости от концентрации электронов в зоне проводимости согласно выражению [18]

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \left(1 + \exp \frac{E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - F_e}{T} \right)^{-1} d^3 \mathbf{k}. \quad (6)$$

Здесь m_e — эффективная масса электронов в твердом растворе HgCdTe, E_c — энергия дна зоны проводимости HgCdTe.

Для анализа полученных результатов применительно к реальным структурам, получаемым методом МЛЭ [19], кроме времени жизни носителей в рассматриваемом процессе ШРХ, необходимо определить и характерные времена других процессов: межзонной рекомбинации при излучательных переходах, а также оже-процессов. Времена излучательной и оже-рекомбинации в настоящей работе рассчитывались по широко используемым в литературе приближенным аналитическим формулам, приведенным, например, в работах [2, 20]. В выражении для времени оже-рекомбинации помимо констант, характеризующих материал, входит пороговая энергия (E_{th}) различных оже-процессов и параметр $|F1F2|^2$. В настоящей работе пороговые энергии рассчитывались не приближенно (аналитически), а численно на основе энергетического спектра, получаемого в модели Берта–Форемана с гамильтонианом Кейна 8×8 [21, 21]. $F1$ и $F2$ представляют собой интегралы перекрытия волновых функций в различных состояниях, занимаемых электронами при оже-процессе. Аналитическое выражение для $F1$ и $F2$ можно найти в классической работе Бити и Лансберга [23], однако в подавляющем большинстве работ величина $|F1F2|^2$ рассматривается как подгоночный параметр [24]. Как правило, в большинстве публикаций $|F1F2| \sim 0.2$, однако в последних работах встречаются значения порядка 0.05. Для того чтобы учесть данные различных публикаций при анализе результатов настоящей работы, ниже приведены времена оже-рекомбинации для значений $|F1F2|$ во всем диапазоне от 0.05 до 0.2.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Были рассчитаны частоты захвата электронов из зоны проводимости на A_2^{-1} -центры при испускании одиночных оптических фононов. Отметим,

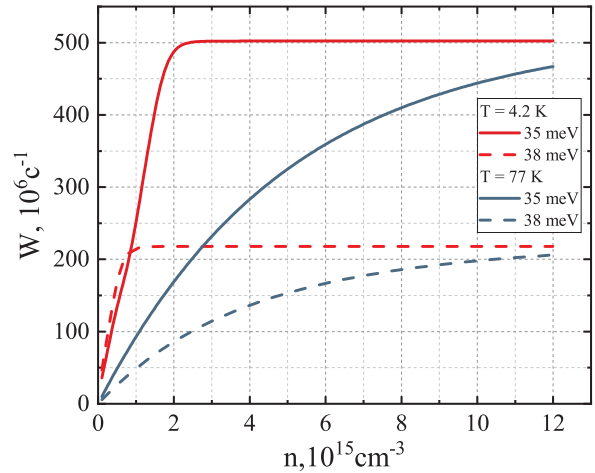


Рис. 1. Рассчитанные частоты переходов электронов из зоны проводимости на A_2^{-1} -центр в зависимости от их концентрации при различных значениях ширины запрещенной зоны HgCdTe. Расчет выполнен для диапазона концентраций от 10^{13} см^{-3} до $1.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$

что в отличие от процесса захвата дырок на акцепторные уровни, захват электронов может происходить только напрямую на основной уровень акцептора, поскольку нет промежуточных уровней между зоной проводимости и основным акцепторным состоянием. Расчет частоты захвата электронов из зоны проводимости проводился на основном уровне A_2^{-1} -центра, расположенный на 20 мэВ выше края валентной зоны. Поскольку энергии оптических фононов лежат в пределах от 15 до 17.5 мэВ для HgTe-подобного фонона и от 18 до 20 мэВ для CdTe-подобного фонона, переходы электронов на основное состояние A_2^{-1} -центра будут происходить, если ширина запрещенной зоны E_g находится в пределах от 35 до 40 мэВ.

На рис. 1 представлены рассчитанные частоты переходов из зоны проводимости на A_2^{-1} -центр в зависимости от концентрации электронов в зоне при различных значениях E_g и температуры T . Видно, что при увеличении концентрации от 10^{13} см^{-3} наблюдается линейный рост интенсивности переходов, выходящий на насыщение выше некоторой концентрации носителей в зоне проводимости. Это связано с тем, что переходы на акцепторные состояния возможны для носителей, имеющих кинетическую энергию лишь в определенном диапазоне. Для ширины запрещенной зоны 38 мэВ это не более $20 - 18 = 2 \text{ мэВ}$ (разница между максимальной энергией оптического фонона и величиной энергетического зазора между краем зоны проводимости и

акцепторным уровнем), а для ширины запрещенной зоны 35 мэВ не более $20 - 15 = 5$ мэВ. С увеличением концентрации частота переходов сначала растет из-за увеличения числа частиц, испускающих фононы, а затем, когда уровень Ферми оказывается выше края зоны больше чем на 2 (5) мэВ и число частиц, участвующих в переходах, становится постоянным, рост частоты переходов прекращается. При температуре жидкого азота зависимость частоты переходов от концентрации носителей в зоне более плавная из-за размытия функции распределения электронов в зоне проводимости при повышении температуры. Видно, что время испускания оптического фотона при захвате электронов на центр A_2^{-1} для достаточно высокой концентрации носителей в зоне оказывается порядка 2 – 5 нс.

Также были рассчитаны частоты переходов дырок из валентной зоны при испускании оптического фотона на основное состояние A_2^{-2} -центра вакансии ртути. Оказалось, что время такого перехода для твердого раствора с долей кадмия 18.8 % и с шириной запрещенной зоны 36 мэВ (при этом энергия ионизации A_2^{-2} -центра составляет 18 мэВ) составляет 3 пс. Таким образом, время захвата электронов на A_2^{-1} -центр вакансии ртути оказалось на три порядка больше времени захвата дырок. Поэтому можно ожидать, что время рекомбинации ШРХ определяется переходами электронов. В этом случае время рекомбинации ШРХ можно рассчитать по следующей формуле (см. Приложение):

$$\tau_{SRH} = \tau_{ph} \left(\frac{n}{N_{A_2^{-1}}} \right). \quad (7)$$

Здесь τ_{SRH} — время релаксации числа электронов в зоне проводимости, τ_{ph} — время испускания фотона при захвате на один центр, $N_{A_2^{-1}}$ — концентрация A_2^{-1} -центров, n — концентрация электронов. Таким образом, чтобы рассчитать время рекомбинации ШРХ в узкозонных слоях HgCdTe нужно знать не только время испускания фотона, но и число центров захвата носителей, т. е. число A_2^{-1} -центров. Число таких центров складывается из равновесного числа A_2^{-1} -центров ($N_{A_2^{-1}}^P$) и числа центров, сгенерированных возбуждающим излучением ($N_{A_2^{-1}}^G$):

$$N_{A_2^{-1}} = N_{A_2^{-1}}^P + N_{A_2^{-1}}^G.$$

Учитывая, что процесс захвата дырок на вакансии ртути на три порядка быстрее захвата электронов на такие центры, можно считать, что при рассмотрении процессов релаксации электронов уже

установилось стационарное распределение дырок по состояниям.

Рассмотрим следующие случаи.

3.1. Материал n -типа

В этом случае при низкой температуре все вакансии ртути оказываются в зарядовом состоянии A_2^{-2} (акцепторные центры свободны от дырок). A_2^{-1} -центры возникают благодаря захвату сгенерированных возбуждающим излучением дырок ($N_{A_2^{-1}} = N_{A_2^{-1}}^G$). При этом их концентрация равна концентрации неравновесных дырок (Δp), если число таких дырок не превышает число вакансий ртути, в противном случае дырки полностью заполнят A_2^{-2} -центры (с образованием A_2^{-1} -центров), и оставшиеся частицы будут заполнять появившиеся A_2^{-1} -центры с образованием нейтральных вакансий ртути. Таким образом, в случае HgCdTe — материала электронного типа — справедливо соотношение $N_{A_2^{-1}} \leq \Delta p$. Поскольку при оптическом возбуждении число неравновесных дырок равно числу неравновесных электронов (Δn) для времени рекомбинации ШРХ из соотношения (7) имеем

$$\tau_{SRH} \geq \tau_{ph} \left(\frac{n}{\Delta n} \right). \quad (8)$$

Равенство в соотношении (8) реализуется, когда число вакансий ртути больше числа сгенерированных дырок, т. е. в случае малой интенсивности возбуждения. В случае материала n -типа время жизни неравновесных носителей в процессе рекомбинации ШРХ зависит от их концентрации, даже когда последняя меньше темновой концентрации электронов. Это может приводить к существенно не экспоненциальной динамике релаксации избыточной концентрации носителей, что затрудняет анализ экспериментальных кривых. Поскольку число A_2^{-1} -центров меньше полного числа вакансий ртути, для оценки минимального времени рекомбинации ШРХ из выражения (7) можно использовать следующее соотношение:

$$\tau_{SRH} \geq \tau_{ph} \left(\frac{n}{N_{A_2}} \right). \quad (9)$$

Равенство в выражении (9) реализуется, когда число дырок, возникающих при накачке, оказывается равно числу двойных акцепторов. При $T = 4.2$ К оценка времени рекомбинации ШРХ из (9) для HgCdTe с шириной запрещенной зоны 35 мэВ дает величину около 170 нс для равновесной концентрации электронов $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ и концентрации вакансий ртути $2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, что удовлетворительно согласуется с

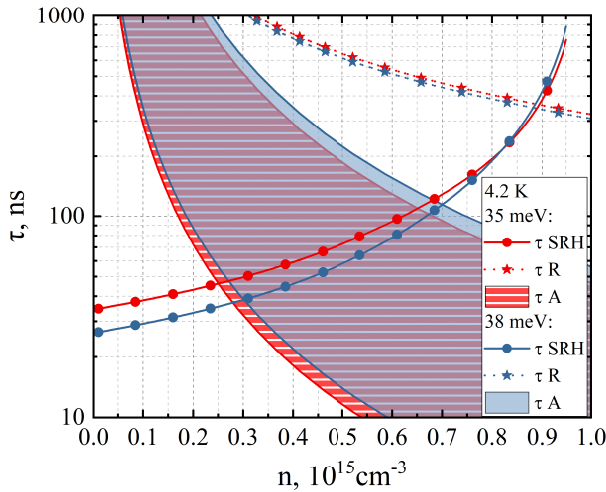


Рис. 2. Рассчитанные для $T = 4.2$ К времена рекомбинации в HgCdTe p -типа в зависимости от концентрации свободных электронов в зоне проводимости. Концентрация компенсирующих доноров равна 10^{15} см^{-3}

экспериментальными данными [25]. При $T = 77$ К оцениваемые времена рекомбинации ШРХ превышают 500 нс и, таким образом, не дают значимого вклада в общее время рекомбинации, поскольку времена оже-рекомбинации оказываются значительно меньше.

3.2. Материал p -типа при $T = 4.2$ К

Равновесное число A_2^{-1} -центров при низкой температуре определяется степенью компенсации: число таких центров равно числу компенсирующих доноров (N_D). При наличии подсветки, как уже отмечалось, сгенерированные дырки за время около 3 пс переходят на A_2^{-1} -центры, превращая их в нейтральные A_2^0 -центры. Тогда число A_2^{-1} -центров при подсветке:

$$N_{A_2^{-1}} = N_d - \Delta p \quad (10)$$

Тогда, с учетом того, что $\Delta p = \Delta n$ и концентрация равновесных электронов при низкой температуре пренебрежимо мала, выражение (7) в этом случае принимает вид

$$\tau_{SRH} = \tau_{ph} \left(\frac{\Delta n}{N_d - \Delta n} \right). \quad (11)$$

На рис.2 представлены графики зависимости времен жизни носителей для трех процессов рекомбинации (рекомбинация ШРХ (τ_{SRH}), рассчитанная из (10), излучательная рекомбинация (τ_R)

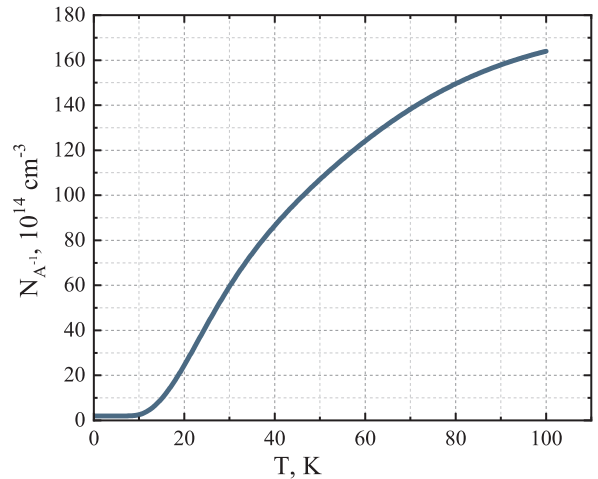


Рис. 3. Зависимость от температуры равновесной концентрации A_2^{-1} -центров вакансий ртути в слое HgCdTe с долей Cd в растворе $x = 17.7\%$. Концентрация компенсирующих доноров составляет $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, концентрация вакансий ртути $N_A^- = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$

и оже-рекомбинации (τ_A) от концентрации свободных электронов в зоне проводимости при $T = 4.2$ К. Расчеты проводились для слоя HgCdTe p -типа, которому соответствуют $E_g = 35$ мэВ и $E_g = 38$ мэВ. Концентрация компенсирующих доноров N_D выбрана равной 10^{15} см^{-3} . Концентрация вакансий ртути предполагается $N_A^- > N_D$. Для времени оже-рекомбинации τ_A показан диапазон значений, соответствующий варьированию подгоночного параметра $|F1F2|$ в пределах от 0.05 до 0.2, аналогично работе [2]. Учитывая, что общее время релаксации τ определяется как

$$\tau^{-1} = \tau_R^{-1} + \tau_{SRH}^{-1} + \tau_A^{-1}, \quad (12)$$

оно соответствует наименьшему времени рекомбинации. На рис.2 видно, что время рекомбинации ШРХ будет оказывать заметное влияние на τ в материале p -типа при концентрации свободных электронов (сумма равновесной и неравновесной концентрации) в зоне проводимости вплоть до значений порядка $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ или порядка $6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ в зависимости от величины $|F1F2|^2$. При больших концентрациях неравновесных электронов общее время рекомбинации контролируется оже-процессами.

3.3. Материал p -типа при $T=77$ К

На рис.3 представлена зависимость от температуры равновесной концентрации A_2^{-1} -центров в слое HgCdTe с долей Cd в растворе $x = 17.7\%$. Зависимость рассчитана методом, представленном в работе [26]. Концентрация вакансий ртути

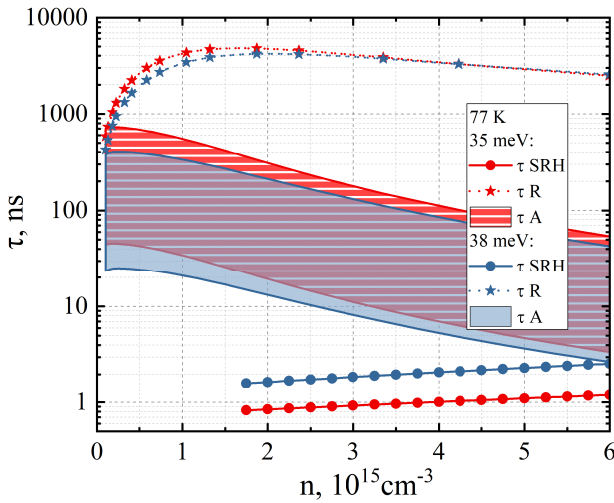


Рис. 4. Рассчитанные для $T = 77$ К времена рекомбинации в HgCdTe p -типа в зависимости от концентрации свободных электронов в зоне проводимости. Концентрация компенсирующих доноров составляет $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, концентрация вакансий ртути $N_A = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$

$N_A = 2.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ была выбрана на уровне максимально достижимой для низкотемпературных отжигов HgCdTe [27]. При $T = 77$ К равновесная концентрация свободных электронов в зоне проводимости была равна $1.75 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, что соответствует типичной «темновой» концентрации в эпитаксиальных пленках, выращиваемых методом МЛЭ [19].

На рис.3 видно, что концентрация $N_{A_2^{-1}}$ при $T = 77$ К составляет $1.4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Следует отметить, что ширина запрещенной зоны в пленке с $x = 17.7\%$ при $T = 77$ К составляет около 38 мэВ.

На рис. 4 представлен график зависимости времен жизни носителей для трех процессов рекомбинации в материале HgCdTe p -типа с $E_g = 35$ мэВ и $E_g = 38$ мэВ. Видно, что время рекомбинации ШРХ составляет порядка нескольких наносекунд в широком диапазоне значений полной концентрации электронов в зоне проводимости и определяет общее время жизни. При увеличении неравновесной концентрации электронов выше $6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ выражение для времени рекомбинации ШРХ без учета изменения заселенности вакансий ртути неравновесными дырками становится неприменимо. Отметим, что для концентраций вблизи равновесной рекомбинация ШРХ останется доминирующим процессом даже при уменьшении концентрации вакансий ртути на порядок. В то же время известно, что в процессе высокотемпературных отжигов возможно увеличение концентрации вакансий вплоть до значений при-

мерно $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [28], что теоретически позволяет уменьшить времена рекомбинации ШРХ до примерно 10 пс. Последнее представляет интерес для гетеродинных приемников, где обеспечение эффективного смещения накладывает достаточно жесткие требования на быстрдействие смесителей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе для различных значений температуры и концентрации носителей в зонах рассчитаны времена захвата электронов и дырок на состояния частично ионизованной вакансии ртути в твердых растворах HgCdTe с шириной запрещенной зоны около 40 мэВ. Показано, что времена переходов электронов на состояния вакансии из зоны проводимости не менее чем на три порядка превышают характерное время захвата дырок. Таким образом, время рекомбинации ШРХ определяется временем захвата электронов на акцепторные состояния. Сравнение темпов различных механизмов рекомбинации показывает, что процесс ШРХ определяет общее время жизни носителей в HgCdTe p -типа с концентрацией вакансий ртути более приблизительно $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ как при температуре жидкого гелия, так и при температуре жидкого азота. Полученные результаты создают предпосылки для управления временем фотоотклика в таких материалах, в том числе в суб-наносекундном диапазоне, путем изменения концентрации вакансий ртути.

Благодарности. Авторы благодарят Е.В. Андронову за помощь в разработке программного обеспечения, использованного в настоящей работе.

Финансирование. Работа поддержана грантами Российского научного фонда 22-12-00298 (расчет времен захвата электронов и дырок на изолированный акцепторный центр) и Российского фонда фундаментальных исследований 21-52-12020 (расчеты времен жизни носителей для различных процессов рекомбинации).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Число захватов электронов одним акцепторным центром равно τ_{ph}^{-1} , тогда изменение числа электронов (n) в зоне проводимости в единицу времени имеет вид

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{1}{\tau_{ph}} N_{A_2^{-1}}, \quad (13)$$

здесь $N_{A_2^{-1}}$ — число центров захвата электронов (A_2^{-1} -центров).

Формулу (13) приведем к виду

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{1}{\tau_{SRH}}n, \quad (14)$$

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{N_{A_2^{-1}}}{n\tau_{ph}}n. \quad (15)$$

Получаем

$$\tau_{SRH} = \tau_{ph} \left(\frac{n}{N_{A_2^{-1}}} \right). \quad (16)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Lei, J. Antoszewski, and L. Faraone, *Appl. Phys. Rev.* **2**, 041303 (2015).
2. K. Jóźwikowski, M. Kopytko, and A. Rogalski, *J. Appl. Phys.* **112**, 033718 (2012).
3. F. Gemain, I.C. Robin, M. De Vita et al., *Appl. Phys. Lett.* **98**, 131901 (2011).
4. B. Li, Y. Gui, Z. Chen et al., *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1538 (1998).
5. T. Sasaki, N. Oda, M. Kawano et al., *J. Crystal Growth.* **117**, 222 (1992).
6. В. В. Румянцев, М. А. Фадеев, С. В. Морозов и др., *Физика и техника полупроводников* **50**, 1679 (2016).
7. M. G. Wolfire and A. Konigl, *The Astrophys. J.* **383**, 205 (1991).
8. K. D. Mynbaev, A. V. Shilyaev, N. L. Bazhenov et al., *Semiconductors.* **49**, 367 (2015).
9. F. Gemain, I. C. Robin, S. Brochen et al., *J. Electr. Materials.* **41**, 2867 (2012).
10. X. Zhang, J. Shao, L. Chen et al., *J. Appl. Phys.* **110**, 043503 (2011).
11. X. Chen, M. Wang, L. Zhu et al., *Appl. Phys. Lett.* **123** (2023).
12. A. Ikonnikov, V. Rumyantsev, M. Sotnichuk et al., *Semiconductor Science and Technology* **38**, 085003 (2023).
13. V. V. Rumyantsev, D. V. Kozlov, S. V. Morozov et al., *Semiconductor Science and Technology* **32**, 095007 (2017).
14. В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984).
15. O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*, Springer-Verlag, New York (2003).
16. D. N. Talwar and M. Vandevyver, *J. Appl. Phys.* **56**, 1601 (1984).
17. Д. В. Козлов, М. С. Жолудев, К. А. Мажукина и др., *Физика и техника полупроводников* **57**, 432 (2023).
18. В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, *Физика полупроводников* Наука, Москва (1977).
19. V. S. Varavin, V. V. Vasiliev, S. A. Dvoretzky et al., *Proc. SPIE.* **5136**, 381 (2003).
20. S. Krishnamurthy, M. A. Berding, and Z. G. Yu, *J. Electron. Materials* **35**, 1369 (2006).
21. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth et al., *Phys. Rev. B* **72**, 035321 (2005).
22. S. V. Morozov, V. V. Rumyantsev, M. S. Zholudev et al., *ACS Photonics* **8**, 3526 (2021).
23. A. R. Beattie and P. T. Landsberg, *Proc. of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **249**, 16 (1959).
24. Н. Л. Баженов, К. Д. Мынбаев, Г. Г. Зегря, *Физика и техника полупроводников* **49**, 444 (2015).
25. V. V. Rumyantsev, S. V. Morozov, A. V. Antonov et al., *Semiconductor Science and Technology* **28**, 125007 (2013).
26. Д. В. Козлов, М. С. Жолудев, В. В. Румянцев и др., *Физика и техника полупроводников* **56**, 465 (2022).
27. П. А. Бахтин, С. А. Дворецкий, В. С. Варавин и др., *Физика и техника полупроводников* **38**, 1207 (2004).
28. D. Chandra, H. F. Schaake, J. H. Tregilgas et al., *J. Electronic Materials* **29**, 729731 (2000).