

ЗАХВАТ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА НА СОСТОЯНИЯ ВАКАНСИЙ РТУТИ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ С МАЛОЙ ШИРИНОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ

Д. В. Козлов ^{a,b}, В. В. Румянцев ^{a,b*}, К. А. Мажукина ^a, Е. Н. Кирьянова ^{a,b},
В. И. Гавриленко ^{a,b}

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

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

Поступила в редакцию 29 октября 2025 г.
после переработки 21 апреля 2026 г.
Принята к публикации 23 мая 2026 г.

Для гетероструктур $\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с квантовыми ямами рассчитано время захвата электронов из зоны проводимости и дырок из валентной зоны на состояния вакансий ртути в запрещенной зоне при испускании одиночных оптических фононов. Как и в объемном материале, время захвата электронов значительно больше времени захвата дырок, и скорость рекомбинации Шокли–Рида–Холла определяется захватом электронов. Результаты позволили описать процесс возникновения терагерцевой фотолюминесценции с участием вакансий ртути и немонотонной зависимости ее интенсивности от мощности оптического возбуждения.

Ключевые слова: HgCdTe , квантовые ямы, вакансии ртути, рекомбинация Шокли–Рида–Холла, оптические фононы, терагерцевая фотолюминесценция

DOI: 10.31857/S0044451026080044

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы не угасает интерес к узкозонным гетероструктурам на основе HgCdTe (КРТ) в связи с возможностью реализации дираковского энергетического спектра в достаточно узких квантовых ямах (КЯ) $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ [1]. Последнее позволяет изучать как необычные фундаментальные эффекты [2–4], так и представляет интерес для инфракрасной оптоэлектроники [3, 5–7]. В частности, релятивистский спектр позволяет полностью подавить оже-рекомбинацию даже в структурах с шириной запрещенной зоны несколько десятков миллиэлектронвольт [8]. Последнее создает предпосылки для использования таких структур для приемников и источников среднего и дальнего ИК-диапазонов при условии подавления прочих безызлучательных

механизмов рекомбинации, главным из которых является рекомбинация через состояния дефектов в запрещенной зоне, часто называемая рекомбинацией Шокли–Рида–Холла (ШРХ). Самым распространенным дефектом в HgCdTe является вакансия ртути, которая возникает из-за слабости химической связи ртуть–теллур [9, 10]. Наибольший интерес представляют КЯ с шириной запрещенной зоны менее 50 мэВ, так как в этом случае 1) рабочая длина волны λ попадает в диапазон $\lambda > 25$ мкм, в котором в настоящий момент наблюдается «дефицит» как быстрых нетепловых приемников, так и компактных полупроводниковых лазеров [11]; 2) состояния вакансий ртути, которые всегда присутствуют в материалах HgCdTe , находятся вблизи середины ширины запрещенной зоны и оказывают значительное влияние на темпы релаксации носителей; 3) захват электронов на состояния вакансий может происходить с испусканием одного оптического фонона, что делает процесс рекомбинации быстрым.

* E-mail: rumyantsev@ipmras.ru

Ранее было опубликовано много работ [12–18], посвященных рекомбинации ШРХ в объемных слоях КРТ, однако для КЯ аналогичные исследования практически не проводились. В частности, в работе [12] показано, что терагерцевая (ТГц) фотолюминесценция (ФЛ), наблюдаемая в структурах на основе КРТ [19], связана с накоплением дырок на мелких возбужденных уровнях нейтральной вакансии ртути и с излучательными переходами носителей с этих уровней на основное состояние. В работе [13] был рассчитан темп захвата электронов из зоны проводимости на состояния вакансий ртути в объемных слоях КРТ. Показано, что время захвата электронов в КРТ больше времени захвата дырок из валентной зоны на состояния вакансий ртути почти на три порядка. Это связано со слабым взаимодействием состояний зоны проводимости с состояниями вакансий ртути, привязанными к валентной зоне, из-за чего переходы с испусканием фононов между зонами квазизапрещены. Также следует отметить, что между зоной проводимости и основным уровнем вакансии ртути нет промежуточных состояний, и переходы частиц из зоны проводимости при участии одиночных акустических фононов невозможны. В результате, захват электронов на состояния вакансий ртути определяется испусканием оптических фононов.

В настоящей работе исследован процесс рекомбинации ШРХ с испусканием фононов в гетероструктурах $\text{HgTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с КЯ. Для апробации метода расчета была выбрана КЯ, в которой наблюдается характерная ТГц-ФЛ с участием состояний вакансий ртути [20]. Поскольку вакансии является двузарядным акцептором, для нее возможны три зарядовых состояния: 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, свободный от дырок. Отметим, что в отсутствие подсветки при низкой температуре в квантовой яме исследуемой гетероструктуры присутствует концентрация свободных дырок $\sim 4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, и, таким образом, уровень Ферми при низкой температуре находится в «валентной зоне» (в верхней дырочной подзоне размерного квантования), а все вакансии ртути находятся в зарядовом состоянии A_2^0 . Подсветка создает электрон-дырочные пары в барьере, после чего электроны и дырки захватываются в КЯ, создавая там неравновесную концентрацию носителей. Результаты расчета вероятности рекомбинации неравновесных носителей в КЯ при захвате дырок на A_2^{-1} -центр и электронов на A_2^0 -центр позволяют

описать наблюдаемые в эксперименте особенности ТГц-ФЛ.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

На рис. 1 показана ростовая схема структуры, для которой проводился расчет. Доля кадмия в барьерах, типичная для подобных структур, составляет около 0.76, толщина барьеров 300 Å, а толщина КЯ из HgTe равна 48 Å. Ориентация подложки предполагалась (013), что соответствует большинству экспериментально исследованных структур [5, 8], выращенных на подложке из GaAs с метаморфным CdTe -буфером.

Ширина запрещенной зоны в описанной КЯ составляет 46 мэВ при $T = 30 \text{ К}$, 52 мэВ при $T = 50 \text{ К}$ и 58 мэВ при $T = 70 \text{ К}$. При этом энергия отрыва первой дырки от вакансии ртути (энергия связи A_2^0 -центра) в зависимости от положения вакансии представлена на рис. 2. Видно, что эта энергия меняется от 10 мэВ (если вакансия расположена в барьере) до 40 мэВ при помещении вакансии в середину ямы. Таким образом, энергетический зазор ΔE_c между зоной проводимости и основным состоянием нейтральной вакансии ртути составляет от 6 до 36 мэВ при $T = 30 \text{ К}$, от 12 до 42 мэВ при $T = 50 \text{ К}$ и от 18 до 48 мэВ при $T = 70 \text{ К}$. При этом энергия ионизации вакансий практически не зависит от температуры. В твердом растворе КРТ существуют фононные моды двух типов: CdTe -подобные оптические фононы с энергией от 18 до 20 мэВ и HgTe -подобные оптические фононы с энергией от 15 до 17.5 мэВ. Таким образом, энергия перехода носителей на уровни нейтральной вакансии ртути как из валентной зо-

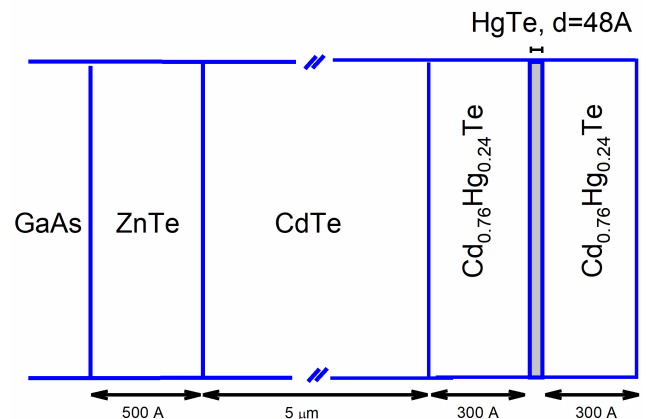


Рис. 1. Схема структуры, для которой проводился расчет

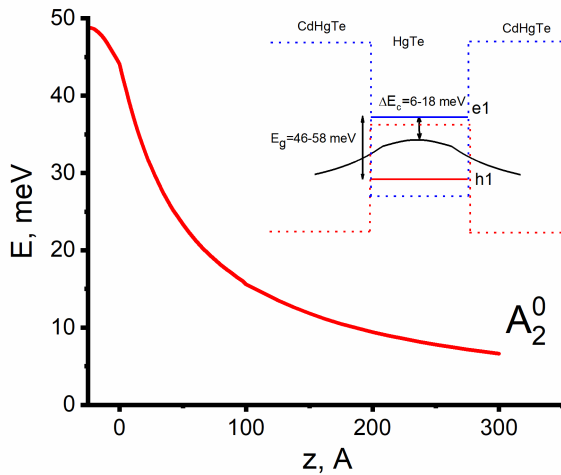


Рис. 2. Энергия отрыва первой дырки от вакансии ртути (энергия связи A_2^0 -центра) в зависимости от положения вакансии. Начало координат $z = 0$ соответствует центру квантовой ямы (середине слоя HgTe (см. рис. 1)). На вставке: пунктир — положение краев зон проводимости (синие линии) и валентной зоны (красные линии). Сплошными линиями показано положение нижних уровней размерного квантования электронов и дырок. Черная кривая — положение уровня A_2^0 -центра при различном положении вакансии ртути в гетероструктуре

ны, так и из зоны проводимости оказывается в полосе энергий оптических фононов. Поскольку в полярных материалах, как правило, наибольшей интенсивностью обладает деформационно-оптическое взаимодействие, будем рассматривать переходы носителей при испускании электронами и дырками оптических фононов.

Интенсивность переходов носителей из верхней валентной подзоны и нижней подзоны проводимости на основное состояние частично ионизованной вакансии ртути (A_2^{-1} -центра) при испускании оптического фонона рассчитывалась на основе золотого правила Ферми. Подробно метод расчета изложен в [13]. Энергии и волновые функции рассчитывались методом, изложенным в [21]: решалось уравнение Шредингера для огибающих волновых функций, включающее гамильтониан Кейна, потенциал иона акцептора и потенциал центральной ячейки, описывающий «химический» сдвиг. Волновые функции состояний дырок непрерывного спектра рассчитывались вне борновского приближения с учетом потенциала примесного центра, а волновые функции электронов в зоне проводимости выбирались в виде плоских волн.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 представлены рассчитанные частоты захвата электронов из зоны проводимости на единичный A_2^0 -центр вакансии ртути в исследуемой структуре в зависимости от концентрации электронов в нижней электронной подзоне размерного квантования при различных значениях температуры. Видно, что для всех температур частота при низкой концентрации носителей в зоне растет приблизительно по линейному закону, а затем насыщается. Аналогичная зависимость интенсивности захвата электронов на состояния вакансий ртути наблюдалась и для объемных слоев КРТ. Это связано с тем, что переходы на акцепторные состояния происходят с участием электронов, имеющих кинетическую энергию, равную $\hbar\omega_{LO}(q_{\perp}) - \Delta E_c$, где $\omega_{LO}(q_{\perp})$ — частота оптического фонона. При этом видно, что переходы возможны на состояния, для которых $\Delta E_c \leq 20$ мэВ (максимальная энергия оптических фононов). Если это условие выполняется, то при испускании одиночного оптического фонона на акцепторные уровни могут быть захвачены электроны, имеющие энергию $20 \text{ мэВ} - \Delta E_c$. Как уже отмечалось, возбужденные накачкой электроны быстро приходят в состояние квазиравновесия с функцией распределения Ферми, и при низкой температуре возникают практически полностью заполненные электронами состояния в первой электронной подзоне размерного квантования. Кинетическая энергия таких электронов меньше энергии Ферми E_F в зоне проводимости, определяемой из концентрации носителей. При этом, если $E_F < \hbar\omega_{LO \text{ max}} - \Delta E_c$, то в переходах на состояния вакансий ртути участвуют все электроны, т. е. число участвующих в переходах частиц определяется их концентрацией, а когда с ростом числа носителей энергия Ферми начинает превышать $\hbar\omega_{LO \text{ max}} - \Delta E_c$, число электронов, участвующих в переходах на вакансии ртути, становится постоянным.

На рис. 3 видно, что интенсивность захвата электронов на состояния вакансий ртути падает с ростом температуры. Это связано с изменением числа носителей, участвующих в переходах на локализованные уровни из-за температурного размывания функции распределения электронов, вследствие чего часть носителей получает кинетическую энергию больше $\hbar\omega_{LO \text{ max}} - \Delta E_c$. Еще одним фактором, уменьшающим интенсивность захвата электронов на локализованные состояния, является изменение ширины запрещенной зоны и, следовательно, значения ΔE_c от 6 мэВ при $T = 30 \text{ К}$ до 18 мэВ при $T = 70 \text{ К}$,

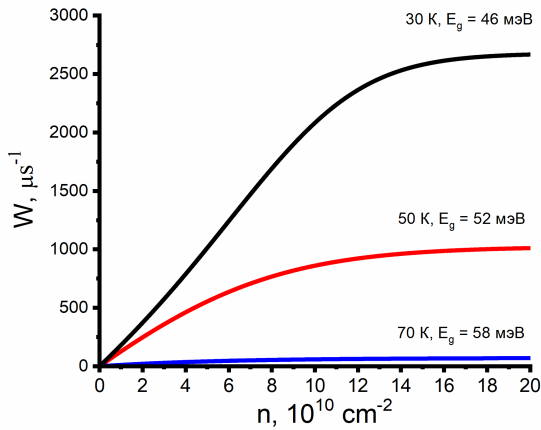


Рис. 3. Рассчитанные частоты захвата электронов из зоны проводимости на A_2^0 -центры вакансии ртути в исследуемой структуре в зависимости от концентрации электронов в нижней электронной подзоне размерного квантования при различных значениях температуры

что приводит к снижению «потолка» кинетической энергии носителей, участвующих в переходах из зоны проводимости на локализованные состояния, и к уменьшению числа таких носителей.

Отметим, что аналогичная зависимость будет наблюдаться при изменении толщины КЯ HgTe. С увеличением толщины слоя HgTe ширина запрещенной зоны E_g уменьшается, а при уменьшении толщины слоев E_g увеличивается. Аналогичная зависимость от ширины КЯ будет у энергетического зазора между зоной проводимости и уровнями A_2^0 -центра, на которые происходит захват электронов. При этом в первом случае будет наблюдаться рост интенсивности захвата электронов на состояния вакансий ртути в связи с увеличением числа носителей, участвующих в переходах на локализованные уровни из-за повышения «потолка» кинетической энергии носителей, участвующих в таких переходах. Во втором случае при уменьшении толщины слоя HgTe, напротив, из-за увеличения ширины запрещенной зоны и отдаления уровня A_2^0 -центра от края зоны проводимости происходит снижение «потолка» кинетической энергии носителей, участвующих в переходах, и снижение интенсивности захвата электронов на состояния вакансий ртути.

На рис. 4 представлены рассчитанные зависимости частот захвата дырок из валентной зоны на A_2^{-1} -центры вакансии ртути в исследуемой структуре от концентрации дырок в верхней дырочной подзоне размерного квантования при различных значениях

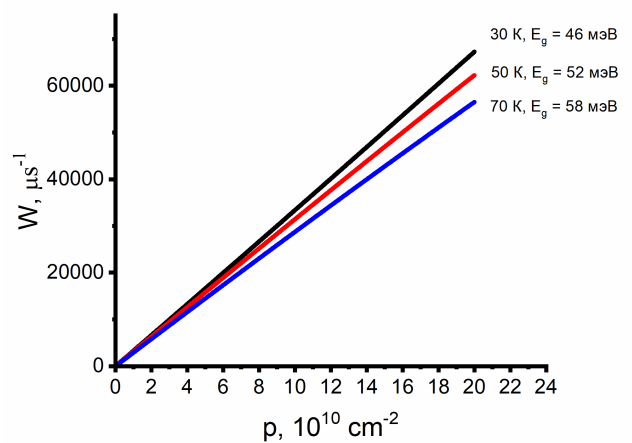


Рис. 4. Рассчитанные частоты захвата дырок из валентной зоны на A_2^{-1} -центры вакансии ртути в исследуемой структуре в зависимости от концентрации дырок в верхней дырочной подзоне размерного квантования при различных значениях температуры

ниях температуры. Видно, что, в отличие от случая захвата электронов, при рассматриваемых концентрациях носителей зависимость частот захвата дырок остается линейной. Это связано с большей, чем у электронов, эффективной массой дырок в верхней подзоне размерного квантования и, следовательно, большей плотностью состояний. Аналогично случаю с электронами, в переходах на локализованные состояния участвуют дырки с кинетической энергией, равной $\hbar\omega_{LO}(q_{\perp}) - E_i$ (где E_i — энергия ионизации нейтральной вакансии ртути), и зависимость частот захвата дырок остается линейной, если $E_F < \hbar\omega_{LO \max} - E_i$, что выполняется для представленных концентраций свободных носителей.

Частоты захвата дырок на локализованные состояния уменьшаются с ростом температуры, как и в случае захвата электронов. В случае захвата дырок уменьшение связано с температурным размыванием функции распределения, которое приводит к уменьшению числа носителей, имеющих кинетическую энергию, позволяющую участвовать в переходах на локализованные уровни с испусканием одиночного оптического фотона. Зависимость частоты захвата от температуры для дырок менее значительна, чем для электронов, поскольку E_i с изменением температуры не меняется и, в отличие от случая электронов, «потолок» кинетической энергии для дырок, участвующих в переходах на локализованные состояния с ростом температуры, не уменьшается.

Как было сказано выше, при отсутствии подсветки и при низкой температуре вакансии ртути в квантовой яме гетероструктуры находятся в зарядовом состоянии A_2^0 . Захват электрона переводит вакансию ртути в состояние A_2^{-1} -центра, на который может быть захвачена дырка. Захват дырки на A_2^{-1} -центр переводит вакансию ртути обратно в состояние A_2^0 . Запишем уравнения непрерывности для числа A_2^0 - и A_2^{-1} -центров:

$$\frac{\partial N_{A_2^{-1}}}{\partial t} = -\frac{N_{A_2^{-1}}}{\tau_p} + \frac{N_{A_2^0}}{\tau_n}, \quad (1)$$

где $N_{A_2^{-1}}$ и $N_{A_2^0}$ — концентрации A_2^{-1} - и A_2^0 -центров соответственно, $\tau_{p,n}$ — время захвата дырок и электронов соответственно. При этом концентрации центров связаны соотношением

$$N_{A_2^{-1}} + N_{A_2^0} = N_{A_2},$$

где N_{A_2} — полное число вакансий ртути, являющееся постоянной величиной. Подставляя это соотношение в (1), получим

$$\frac{\partial N_{A_2^{-1}}}{\partial t} = -N_{A_2^{-1}} \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_n} \right) + \frac{N_{A_2}}{\tau_n}. \quad (2)$$

В стационарном случае получаем

$$N_{A_2^{-1}} = N_{A_2} \frac{\tau_p}{\tau_n + \tau_p}. \quad (3)$$

Из соотношения (3) следует, что если время захвата дырок много меньше времени захвата электронов, или темп захвата дырок на вакансии ртути много больше темпа захвата электронов, число A_2^{-1} -центров стремится к нулю, все вакансии ртути оказываются в зарядовом состоянии A_2^0 . В таком случае при низкой температуре не должна наблюдаться ТГц-ФЛ, связанная с акцепторами, поскольку A_2^0 -центры в формировании сигнала ФЛ не участвуют (нет свободных состояний для излучательных переходов дырок из валентной зоны). Тем не менее в присутствии подсветки концентрация электронов и дырок в КЯ может быть различной: свободные носители, образующиеся в барьере при оптическом возбуждении, захватываются в КЯ после дрейфа к ней, скорость которого у электронов и дырок может различаться в ~ 30 раз из-за разницы эффективных масс. Если время дрейфа частиц оказывается много меньше времени рекомбинации, то можно считать, что сгенерированные носители сконцентрированы в КЯ, а если они сравнимы, то следует считать носители распределенными по

всей структуре. Таким образом, концентрация электронов в яме может значительно превышать концентрацию дырок, и интенсивности захвата электронов и дырок оказываются сравнимы, из-за чего в структуре возникает значительная концентрация A_2^{-1} -центров, участвующих в рекомбинации. Отметим, что с ростом интенсивности накачки увеличивается число сгенерированных носителей и, следовательно, концентрации свободных электронов и дырок в КЯ. При этом, как видно на рис. 3 и 4, интенсивность захвата электронов с ростом концентрации носителей становится постоянной при тех значениях концентрации, при которых интенсивность захвата дырок продолжает расти. Это приводит к тому, что при некоторых значениях интенсивности накачки соотношение $\tau_p/(\tau_n + \tau_p)$ начнет уменьшаться, а значит, уменьшится концентрация A_2^{-1} -центров, что приведет к падению интенсивности ФЛ, как и наблюдалось ранее в эксперименте [20].

Применим теперь результаты расчетов к анализу влияния рекомбинации через состояния вакансии ртути в лазерных структурах с КЯ на основе HgCdTe, рассчитанных на диапазон длин волн ~ 25 мкм. Характерное значение неравновесной концентрации носителей, необходимой для усиления на межзонных переходах в подобных структурах, составляет $n = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ [8]. Время рекомбинации ШРХ в данном случае можно оценить по формуле [13]

$$\tau_{SRH} = \frac{n}{W N_{A_2^0}}. \quad (4)$$

В структурах, в которых согласно экспериментальным данным доминирует излучательная рекомбинация, концентрация центров рекомбинации по оценкам составляет порядка 10^9 см^{-2} [22], что дает для времени рекомбинации ШРХ значение 45 нс, которое превышает время излучательной рекомбинации для подобных структур [8]. Для структур с более высокой концентрацией дефектов (на уровне темновой концентрации носителей) оцениваемое время жизни падает до единиц наносекунд, что также находится в хорошем согласии с временем жизни носителей, определяемым по величине порога генерации в лазерных структурах на основе подобных КЯ [8]. Отметим, что потенциальное влияние центров рекомбинации друг на друга пренебрежимо мало, так как среднее расстояние между центрами при реалистичной поверхностной концентрации дефектов (менее 10^{14} см^{-2}) более чем на порядок превышает масштаб локализации волновой функции дырки на вакансии ртути.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе рассчитаны вероятности захвата носителей с испусканием одиночных оптических фононов в гетероструктурах $\text{HgTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с КЯ, которые позволяют с хорошей точностью определить время безызлучательной рекомбинации через акцепторные центры, связываемые с вакансиями ртути. Результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными из предшествующих работ. Поскольку, как и в объемных слоях КРТ, время захвата электронов из зоны проводимости на уровни вакансий ртути значительно больше времени захвата дырок из валентной зоны, время рекомбинации определяется в основном захватом электронов, темп которого демонстрирует насыщение с ростом концентрации. Последнее позволяет объяснить немонотонную зависимость интенсивности сигнала ТГц-ФЛ, связанную с акцепторами, от мощности накачки. Результаты расчетов могут быть использованы для определения концентраций рекомбинационных дефектов в структурах с КЯ на основе HgCdTe , используемых для детектирования или генерации излучения в длинноволновом диапазоне.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00298).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем расчет частоты переходов на основное состояние A_2^{-1} -центра вакансии ртути дырок из верхней валентной подзоны размерного квантования (верхняя валентная подзона) и электронов из нижней подзоны размерного квантования зоны проводимости (нижняя подзона проводимости).

Интенсивность переходов носителей из верхней валентной подзоны и нижней подзоны проводимости на основное состояние частично ионизованной вакансии ртути (A_2^{-1} -центра) при испускании оптического фонона рассчитывалась на основе золотого правила Ферми. Фононы вызывают смещения атомов и тем самым искажают идеальный периодический потенциал решетки. Обозначим поправку к потенциалу кристалла, обусловленную колебаниями решетки, как δV . Потенциал δV можно разложить

на электростатическое макрополе $\delta\tilde{V}$ и деформационное микрополе $\delta\tilde{V}$, $\delta V = \delta\tilde{V} + \delta\tilde{V}$ [23]. Макрополе возникает только в полярных полупроводниках, в которых при смещении атомов решетки возникает поляризация.

Согласно [23] вероятность испускания поперечного оптического фонона равна нулю, а для продольного фонона вероятность испускания в единицу времени при переходе дырки из валентной зоны в основное состояние акцептора принимает вид

$$W_{i \rightarrow f} = \int \left[\frac{16\pi^3 a^3}{\mu \omega_{LO}(q_{\perp})} \right] \frac{e^2 \gamma^2}{q_{\perp}} \times \\ \times |\langle \Psi_{\text{cont}} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \Psi_0 \rangle|^2 (N_{\Phi}(q_{\perp}) + 1) \times \\ \times \delta(\varepsilon_{\text{cont}} - \hbar \omega_{LO}(q_{\perp}) - \varepsilon_0) d^2 \mathbf{q}_{\perp}, \quad (5)$$

где

$$\mu = \frac{m_{\text{Hg}} m_{\text{Te}}}{m_{\text{Hg}} + m_{\text{Te}}}$$

— приведенная масса атомов элементарной ячейки (атомов теллура и ртути), $N_{\Phi}(q_{\perp})$ — числа заполнения фононных состояний, $\mathbf{q}_{\perp}$ — волновой вектор фонона в плоскости квантовой ямы, $\omega_{LO}(q_{\perp})$ — частота продольного оптического фонона, a — постоянная решетки твердого раствора $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, Ψ_{cont} , Ψ_0 , $\varepsilon_{\text{cont}}$, ε_0 — волновые функции и энергии состояний непрерывного спектра и основного локализованного акцепторного уровня (A_2^0 -центра вакансии ртути). Согласно [23] значение коэффициента γ для продольных оптических фононов имеет вид

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

где κ_{∞} — высокочастотная и κ_0 — статическая диэлектрические проницаемости твердого раствора КРТ соответственно, $\omega_{LO}(0)$ — частота продольного оптического фонона при $\mathbf{q} = 0$. Значения диэлектрических проницаемостей для твердого раствора были рассчитаны как линейная интерполяция между значениями для HgTe и CdTe , взятых из [24]. Частота продольного оптического фонона, согласно [25], изменяется от 20 мэВ при $\mathbf{q} = 0$ до 16 мэВ на краю зоны Бриллюэна. Для нахождения величины a использовалась линейная интерполяция между значениями постоянных решеток для HgTe (6.46 Å) и CdTe (6.48 Å) [21]. Энергии и волновые функции рассчитывались методом, изложенным в [26]: решалось уравнение Шредингера для огибающих волновых функций, включающее гамильтониан Кейна, потенциал иона акцептора и потенциал центральной ячейки, описывающий химический сдвиг. Волновые функции состояний дырок

непрерывного спектра рассчитывались вне борновского приближения с учетом потенциала примесного центра, а волновые функции электронов в зоне проводимости выбирались в виде плоских волн.

Частота захвата дырки (обратное время захвата) из непрерывного спектра может быть получена из выражения (5) интегрированием по состояниям непрерывного спектра в валентной зоне или в зоне проводимости с учетом функции распределения дырок или электронов соответственно

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\text{cont}} W_{\text{cont} \rightarrow f} f. \quad (6)$$

В [26] показано, что время жизни носителей при пьезо-акустическом рассеянии в слоях КРТ составляет доли пикосекунд. Поэтому функцию распределения f можно считать квазиравновесной:

$$f = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_{\text{cont}} - F}{T}\right)}, \quad (7)$$

где F — квазиуровень Ферми для электронов или дырок.

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Büttner, C. X. Liu, G. Tkachov et al., Nat. Phys. **7**, 418 (2011).
2. P. Olbrich, C. Zoth, P. Vierling et al., Phys. Rev. B **87**, 235439 (2013).
3. T. A. Uaman Svetikova, T. V. A. G. de Oliveira, A. Pashkin et al., ACS Photonics **10**, 3708 (2023).
4. L. Lunczer, P. Leubner, M. Endres et al., Phys. Rev. Lett. **123**, 047701 (2019).
5. S. Ruffenach, A. Kadykov, V. V. Rumyantsev et al., APL Mater. **5**, 035503 (2017).
6. S. Gebert, C. Consejo, S. S. Krishtopenko et al., Nat. Photonics **17**, 244 (2023).
7. M. Marchewka, M. Pasternak, and P. Krzemiński, New J. Phys. **23** (2021).
8. V. V. Rumyantsev, K. A. Mazhukina, V. V. Utochkin et al., Appl. Phys. Lett. **124**, 161111 (2024).
9. W. Chen, G.-M. Rignanese, J. Liu et al., J. Appl. Phys. **135** (2024).
10. D. Jin, Z. Gan, S. Zhou et al., ACS Omega **11**, 13983 (2026).
11. K. Feng, W. Streyer, Y. Zhong et al., Opt. Express **23**, A1418 (2015).
12. D. V. Kozlov, V. V. Rumyantsev, A. V. Ikonnikov et al., Photonics **9**, 887 (2022).
13. D. V. Kozlov, V. V. Rumyantsev, A. A. Yantser et al., J. Exp. Theor. Phys. **138**, 744 (2024) [Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, А. А. Янцер и др., ЖЭТФ **165**, 840 (2024)].
14. D. V. Kozlov, V. V. Rumyantsev, V. Ya. Aleshkin et al., Semiconductors **56**, 1060 (2022) [Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, В. Я. Алешкин и др., ФТП **56**, 1060 (2022)].
15. M. Kopytko, Opto-Electron. Rev. **31**, 144548 (2023).
16. Q. Li, R. Xie, F. Wang et al., Opt. Express **30**, 16509 (2022).
17. K. Jóźwikowski, A. Jóźwikowska, and O. Markowska, IEEE Trans. Electron Devices **69**, 1995 (2022).
18. B. Delacourt, P. Ballet, F. Boulard et al., J. Electron. Mater. **46**, 6817 (2017).
19. Z. Song, X. Chen, J. Zhang et al., Opt. Lett. **51**, 2420 (2026).
20. D. V. Kozlov, V. V. Rumyantsev, A. M. Kadykov et al., JETP Lett. **109**, 657 (2019) [Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, А. М. Кадыков и др., Письма в ЖЭТФ **109**, 679 (2019)].
21. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth et al., Phys. Rev. B **72**, 035321 (2005).
22. D. V. Kozlov, T. A. Uaman Svetikova, A. V. Ikonnikov et al., JETP Lett. **113**, 402 (2021) [Д. В. Козлов, Т. А. Уаман Светикова, А. В. Иконников и др., Письма в ЖЭТФ **113**, 399 (2021)].
23. V. F. Gantmakher and I. B. Levinson, *Carrier Scattering in Metals and Semiconductors*, North-Holland, Amsterdam (1987) [В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984)].
24. O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*, Springer-Verlag, New York (2003).
25. D. N. Talwar and M. Vandevyver, J. Appl. Phys. **56**, 1601 (1984).
26. V. V. Rumyantsev, D. V. Kozlov, S. V. Morozov et al., Semicond. Sci. Technol. **32**, 095007 (2017).

Capture of Charge Carriers by Mercury Vacancy States in Narrow-Gap $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Quantum Wells

D. V. Kozlov^{a,b}, V. V. Rumyantsev^{a,b,}, K. A. Mazhukina^a, E. N. Kiryanova^{a,b},
V. I. Gavrilenko^{a,b}*

^a Institute for Physics of Microstructures, Russian Academy of Sciences
603950, Nizhny Novgorod, Russia

^b Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod
603950, Nizhny Novgorod, Russia

*E-mail: rumyantsev@ipmras.ru

Received October 29, 2025

Revised April 21, 2026

Accepted May 23, 2026

Abstract

The capture times of conduction-band electrons and valence-band holes by mercury vacancy states in the band gap via the emission of single optical phonons are calculated for $\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ heterostructures with quantum wells. As in the bulk material, the electron capture time substantially exceeds the hole capture time, and the Shockley–Read–Hall recombination rate is governed by electron capture. The results allow us to describe the onset of terahertz photoluminescence mediated by mercury vacancies and the nonmonotonic dependence of its intensity on the optical pump power.

Keywords: HgCdTe, quantum wells, mercury vacancies, Shockley–Read–Hall recombination, optical phonons, terahertz photoluminescence

Funding. This work was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 22-12-00298).

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflict of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.