Письма в ЖЭТФ, том 113, вып. 6, с. 399 – 405

Фототермическая ионизационная спектроскопия вакансий ртути в эпитаксиальных пленках HgCdTe

Д. В. Козлов[+], Т. А. Уаман Светикова[×], А. В. Иконников[×], В. В. Румянцев[+*1)], А. А. Разова[+*], М. С. Жолудев[+*], Н. Н. Михайлов[°∇], С. А. Дворецкий[°], В. И. Гавриленко[+*], С. В. Морозов[+*]*

[+]*Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н. Новгород, Россия*

[*]*ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия*

[×]*Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия*

[°]*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

[∇]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 8 октября 2020 г.
После переработки 1 марта 2021 г.
Принята к публикации 1 марта 2021 г.

Исследована терагерцовая фотопроводимость узкозонных твердых растворов $Hg_{1-x}Cd_xTe$, обусловленная вакансиями ртути – мелкими двухзарядными акцепторами. Выполнены расчеты дискретного спектра вакансий ртути и матричных элементов оптических переходов с основного на возбужденные состояния в модели, учитывающей влияние зоны проводимости и модельный потенциал центральной ячейки. Обнаружены возбужденные состояния с малой энергией ионизации, сформированные преимущественно состояниями легких дырок, которым соответствуют большие значения матричных элементов оптических переходов из основных состояний, и показано, что наблюдаемые линии в спектре фотопроводимости обусловлены переходами на такие состояния как для нейтрального, так и для однократно ионизованного акцептора, а не переходами в континуум валентной зоны.

DOI: 10.31857/S1234567821060100

1. Введение. Твердые растворы $Hg_{1-x}Cd_xTe$ (кадмий–ртуть–теллур, КРТ) исследуются уже свыше пяти десятилетий [1]. Одной из главных особенностей данного материала является возможность, варьируя состав, изменять величину запрещенной зоны в широких пределах: от 1.6 эВ в чистом CdTe вплоть до нуля при доле Cd меньше 16.5 %. Это делает структуры на основе HgCdTe перспективным материалом для создания детекторов и источников излучения среднего и дальнего инфракрасного диапазона. Одной из главных проблем при создании упомянутых приборов является существенное влияние примесно-дефектных центров на времена жизни носителей (рекомбинация по механизму Шокли–Рида–Холла). Среди наиболее распространенных точечных дефектов в КРТ следует в первую очередь упомянуть вакансию ртути, которая возникает в данном материале из-за слабой химической связи ртуть–теллур. Вакансия ртути описывается как двухвалентный или двойной акцептор, который может находиться в следующих зарядовых состояниях: нейтральный A_2^0-центр (с акцептором связаны две дырки), частично ионизованный A_2^{-1}-центр (с акцептором связана одна дырка) и полностью ионизованный A_2^{-2}-центр (нет связанных дырок).

Изучение энергетических состояний, так или иначе связываемых с вакансиями ртути, началось достаточно давно. Исследования выполнялись как транспортными (см., например, [2]), так и оптическими методами. В работе [3] для вакансий катионов был найден уровень с энергией ионизации 10–12 мэВ, практически не зависящей от доли кадмия в диапазоне от 0.2 до 0.4. В то же время в работе [4] в схожих образцах отмечалось возрастание энергии ионизации акцепторов при увеличении x. Недавно в работах [5–7] был сделан систематический анализ проявлений мелких акцепторов в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) вблизи межзонного перехода в структурах, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Были обнаружены акцепторы с энергиями ионизации 14, 18 и 27 мэВ, концентрация которых сложным образом изменялась при отжиге структур. В некоторых работах на основе результатов транспортных измерений и исследований ФЛ рассматривалась воз-

1)rumyantsev@ipmras.ru

можность “инвертированного” расположения состояний вакансий ртути: состояния дырки на A_2^{-1}-центре с энергией связи 10.7 мэВ оказывались мельче состояний на A_2^0-центре, которым приписывалась энергия ионизации дырки 27.3 мэВ [8]. Однако в последующей работе авторы показали, что для состава с долей кадмия 45 % такой порядок состояний уже не имеет места [9].

Из представленного краткого обзора видно, что состояния вакансии ртути в основном изучались косвенными методами, и, несмотря на большой массив данных о вакансии ртути как о двойном акцепторе, спектр состояний этого акцептора требует дальнейшего изучения. В данной работе для этой цели был использован метод фурье-спектроскопии фотопроводимости (ФП) в терагерцовом диапазоне, который успешно применялся для исследования примесных состояний в различных полупроводниках (см., например, [10, 11]) и уже использовался в наших работах, посвященных исследованиям твердых растворов и гетероструктур на основе КРТ [12–15].

В работе [13] на основе анализа достаточно большой выборки объемных эпитаксиальных слоев $Hg_{1-x}Cd_xTe$ с проводимостью p-типа в спектрах ФП были идентифицированы особенности, связываемые с вакансиями ртути. В отличие от полосы межзонных переходов, данные особенности не смещались в коротковолновую область с ростом ширины запрещенной зоны из-за повышения температуры [12, 14]. Наблюдаемые особенности описывались в модели эффективной массы с использованием гамильтониана Латтинджера, однако для согласования теории с экспериментом требовалось ввести дополнительный потенциал центральной ячейки (ПЦЯ). При этом положение переходов, связываемых как с ионизацией нейтральных (A_2^0), так и однократно ионизованных (A_2^{-1}) вакансий ртути удалось описать с помощью *одного* набора параметров указанного потенциала.

Недавно в структурах с квантовыми ямами (КЯ) HgTe/CdHgTe наличие именно двух зарядовых состояний у наблюдаемого в спектрах ФП мелкого акцептора было непосредственно продемонстрировано с помощью техники “оптического затвора” [15]. Однако полосы ФП, обусловленные акцепторами, в КЯ имеют большую ширину из-за дисперсии энергии связи дырок, возникающей из-за различной удаленности акцепторных центров от центра ямы. В этой связи интересным представляется исследование поведения акцепторов при изменении внешних параметров в более простом случае объемного материала, чему и посвящена настоящая работа. Поскольку использовавшийся в работе [15] и часто имеющий место в различных гетероструктурах с КЯ эффект остаточной ФП [16–18] не наблюдается в объемных эпитаксиальных пленках КРТ, в данной работе в качестве изменяемого внешнего параметра была выбрана температура измерений.

Для более точного описания экспериментальных данных в настоящей работе расчеты основных и возбужденных состояний A_2^0- и A_2^{-1}-центров, а также матричные элементы переходов на возбужденные состояния с основного уровня акцептора были выполнены в рамках модели Кейна, а не Латтинжера, как в работах [12, 13]. Заселенности различных состояний этих центров и состояний континуума валентной зоны при различных температурах определялись с помощью решения уравнения электронейтральности [14]. Анализ экспериментальных данных и результатов расчета показывает, что особенности спектров ФП связаны с переходами носителей на мелкие возбужденные состояния с последующей термической ионизацией, а не непосредственной фотоионизацией в континуум. Последнее объясняет как “нетипичную” для примесной ФП спектральную форму фотоотклика, так и его зависимость от температуры.

2. Методика эксперимента. Исследовалась эпитаксиальная пленка $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$, полученная методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs(013) с буферными слоями из ZnTe (толщиной 50 нм) и CdTe (толщиной 5 мкм) [19]. Активный слой структуры окружен варизонными слоями КРТ и расположен на буфере из CdTe. Намеренного легирования не проводилось, после роста пленка обладала электронным типом проводимости. Выращенная структура была затем подвергнута отжигу в атмосфере аргона [20]. В результате такого отжига за счет выхода ртути из структуры была создана избыточная концентрация акцепторов (вакансий ртути) над остаточными донорами, и в структуре возникла проводимость p-типа.

Так как после отжига в спектрах ФП возникают несколько полос, обусловленных возбуждением акцепторов (см. [13]), для исследований в данной работе была выбрана структура, в которой наиболее сильно выражены спектральные особенности, связываемые именно с состояниями вакансий ртути (рис. 1): линия 1 в окрестности 10 мэВ и линия 2 в окрестности 20 мэВ. Строго говоря, точное определение энергий переходов, соответствующих линиям 1 и 2, требует электродинамического расчета нормировочной функции, так как они находятся в спектральной области, характеризующейся сильным изменением диэлектрической проницаемости из-за близости к частотам оптических фононов. Однако, как

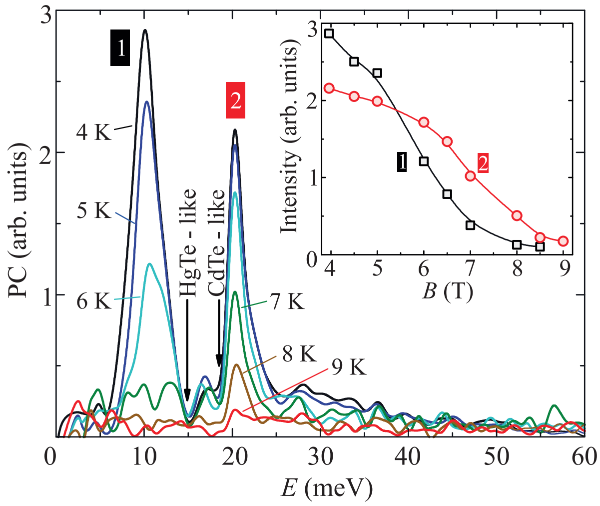

Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры ФП эпитаксиальной пленки $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ при различных температурах. Область межзонного поглощения находится за пределами рисунка, ее красная граница составляет 91 мэВ. Стрелками показаны провалы в спектре, обусловленные поглощением на HgTe- и CdTe-подобных оптических фононах [32]. На вставке: зависимости интенсивностей линий 1 и 2 от температуры

будет видно из дальнейшего, интерпретация линий и зависимостей их интенсивностей от температуры не требует высокой точности в определении их положений. Толщина исследуемой эпитаксиальной пленки составляет 4 мкм, что сравнимо с глубиной проникновения излучения во всем исследуемом спектральном диапазоне, за исключением области 13–18 мэВ, непосредственно примыкающей к линии поглощения на HgTe-подобном поперечном оптическом фононе.

Дополнительным критерием выбора исследуемой структуры было хорошее совпадение значений оптической и термической ширин запрещенной зоны. Оптическая ширина определялась из красной границы межзонного поглощения в спектрах ФП, она составила 91 мэВ. Термическая ширина запрещенной зоны, определенная по температурной зависимости сопротивления, составила 98 мэВ. Близость этих величин указывает на высокое структурное совершенство образца и относительно слабую роль флуктуаций потенциала.

Спектры фотопроводимости измерялись при низких температурах в диапазоне от 3.9 до 10 К с помощью фурье-спектрометра Bruker Vertex 70v. В качестве источника излучения использовался глобар, в качестве светоделителя – Mylar Multilayer. Образцы размером 5×4 мм размещались в проточном криостате Oxford Instruments OptistatCF, который устанавливался в спектрометр так, чтобы образец находился в фокусе пучка излучения. Подробно схема измерений описана в [14].

3. Методика расчета. Расчет как одночастичных (для однократно ионизованного A_2^{-1}-центра), так и двухчастичных состояний (последние реализуются на нейтральном A_2^0-центре) дырок, связанных на акцепторе, проводился в приближении огибающих функций с гамильтонианом Кейна [23]. Гамильтониан представляет собой сумму кинетической энергии дырки и энергии взаимодействия с заряженным центром $V(r)$. Влияние спин-отщепленной зоны не учитывалось из-за ее удаленности по энергии. Потенциальная энергия, помимо кулоновского потенциала, включала в себя модельный деформационный ПЦЯ. Он был выбран, как и во многих работах (см., например, [21, 22]), в виде экранированного кулоновского потенциала точечного заряда. Таким образом, энергия взаимодействия с центром имела следующий вид:

$$V(r) = -\frac{e^2}{kr}[Z - Z_1 \exp(-r/\lambda)], \quad (1)$$

где k – низкочастотная диэлектрическая проницаемость, $Z = 2$ – заряд акцепторного центра, а Z_1 – эффективный заряд и λ – длина экранирования (см. далее).

В полярных материалах использование при расчетах кулоновских центров простой модели с низкочастотной диэлектрической проницаемостью не является очевидным. Ранее в литературе обсуждалось влияние взаимодействия носителей заряда с LO-фононами на энергию связи основного и возбужденных состояний центров (см., например, [24–26] и ссылки в них). В большинстве случаев эти эффекты приводили к малым поправкам к энергиям связи состояний, которые игнорировались при обсуждении спектров возбуждения примесных состояний в реальных полупроводниках (см., например, [10]). В частности, в работе [22] были выполнены расчеты состояний акцепторов в GaAs, ZnSe и CdTe с использованием низкочастотной диэлектрической проницаемости решетки показавшие очень хорошее согласие экспериментом, как для материала, в котором энергия связи акцептора меньше энергии LO-фонона (GaAs), так для полупроводников, в которых имеет место обратное соотношение (ZnTe и CdTe). По-видимому, взаимодействие центров с оптическими фононами в полярных материалах – достаточно тонкий эффект, не проявляющийся при существующих уровнях остаточного легирования и соответственно уширения линий примесных переходов.

При расчете состояний акцептора в растворе КРТ, как и в работах [21, 22], использовалось сферическое приближение, т. е. закон дисперсии дырок полагался изотропным. Значения параметров гамильтониана Кейна и диэлектрической проницаемости в твердом растворе вычислялись с помощью линейной интерполяции между соответствующими значениями параметров в HgTe и CdTe [23].

Подробно метод решения уравнения Шредингера с гамильтонианом Кейна 6×6 для одночастичных состояний и для основного двухчастичного состояния описан в [27]. Для расчета двухчастичных состояний, в котором одна дырка находится на основном уровне энергии, а вторая – на возбужденном, был использован метод самосогласованного поля Хартри [28]. Рассматривались состояния двух частиц, находящихся в поле кулоновского центра и в ПЦЯ. При этом решались одночастичные уравнения Шредингера для каждой из двух дырок:

$$\begin{aligned}&\left[H_K(\nabla_1)-\left(E_1+\frac{e^2\left(Z-Z_1\exp\left(-\frac{r_1}{\lambda}\right)\right)}{\kappa r_1}\right)-\right.\\&\left.\qquad-\frac{e^2}{2\kappa}\int\frac{|\Phi_2(r_2)|^2d^3r_2}{|r_1-r_2|}\right]\Phi_1(r_1)=0,\\&\left[H_K(\nabla_2)-\left(E_2+\frac{e^2\left(Z-Z_1\exp\left(-\frac{r_2}{\lambda}\right)\right)}{\kappa r_2}\right)-\right.\\&\left.\qquad-\frac{e^2}{2\kappa}\int\frac{|\Phi_1(r_1)|^2d^3r_2}{|r_1-r_2|}\right]\Phi_2(r_2)=0,\end{aligned}\tag{2}$$

где $E_{1,2}$ и $\Phi_{1,2}(r_{1,2})$ – энергии и волновые вектор-функции первой и второй дырок соответственно. Полная энергия системы двух частиц равна сумме E_1 и E_2.

Система интегральных нелинейных уравнений (2) решалась методом последовательных приближений, где в качестве первого шага в уравнениях системы были опущены интегральные слагаемые, что позволило найти энергии и волновые функции дырок без учета взаимодействия между носителями. Матричные элементы оптических переходов между состояниями были рассчитаны с помощью золотого правила Ферми.

На рисунке 2 приведены рассчитанные зависимости энергий ионизации A_2^0- и A_2^{-1}-центров от доли кадмия в КРТ в различных моделях расчета. Видно, что при уменьшении x (и уменьшении ширины запрещенной зоны) наклон зависимостей увеличивается, т.е. акцепторные состояния "отталкиваются" от зоны проводимости в отличие от результатов расчетов в модели Латтинжера, не учитывающей влияния зоны проводимости [13]. Однако даже при учете влияния зоны проводимости расчет дает существенно завышенные значения по сравнению с экспериментальными данными. По аналогии со введением химического сдвига (поправки к энергии примесного состояния, обусловленной ПЦЯ) при рассмотрении мелких примесей в полупроводниках [21] в нашем случае, очевидно, также необходимо учитывать ПЦЯ. В большинстве случаев химический сдвиг приводит к увеличению энергии ионизации примесного состояния по сравнению с энергией, рассчитанной в приближении эффективной массы, что связано с тем, что ион примеси "расталкивает" окружающие атомы кристаллической решетки. В случае же вакансии, очевидно, что решетка будет сжиматься вокруг дефекта, создавая дополнительную плотность положительного заряда, отталкивающего дырки [13]. Это будет уменьшать энергию связи (рис. 2).

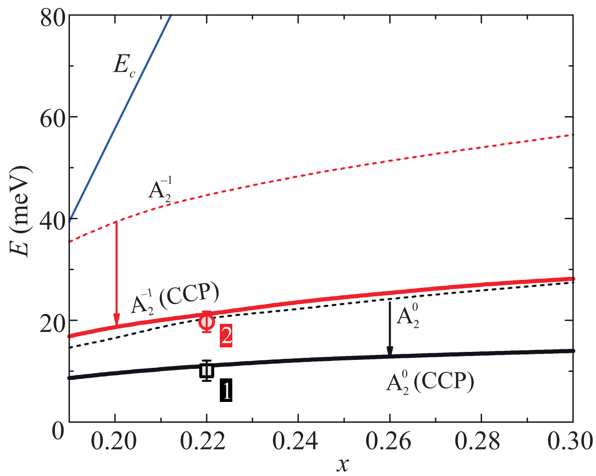

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости от доли Cd x в твердом растворе КРТ энергий ионизации A_2^0- и A_2^{-1}-центров, рассчитанных с учетом (сплошные линии) и без учета (штриховые линии) ПЦЯ в модели Кейна. E_c – зависимость энергии края зоны проводимости от состава. Энергии отсчитываются от вершины валентной зоны. Стрелками показано влияние учета ПЦЯ, приводящего к понижению энергий. Символы – положения особенностей 1 и 2 в спектрах ФП (рис. 1), в качестве погрешностей указана ширина линий на полувысоте

В таблице 1 приведены рассчитанные энергии ионизации возбужденных состояний E_i, энергии переходов на такие состояния с основного акцепторного уровня E_{opt} и квадраты матричных элементов этих переходов для A_2^0- и A_2^{-1}-центров. Расчет приведен для подгоночных параметров $Z_1 = 1.4$, $\lambda = 25$ Å. Следует обратить внимание, что как для A_2^0-, так и для A_2^{-1}-центров расчет предсказывает наличие мелких возбужденных состояний (с энергиями 0.42 и 1.1 мэВ соответственно), переходы в которых с основных состояний имеют большие матричные элементы.

Таблица 1. Рассчитанные энергии нечетных p-подобных (на которые разрешен переход с основного четного s-подобного состояния) состояний A_2^0- и A_2^{-1}-центров вакансий ртути в твердом растворе $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ и квадраты матричных элементов переходов ($|M|^2$) на такие состояния с основных уровней центров. Энергия ионизации (минимальная энергия перехода в континуум) основного уровня A_2^0-центра – 11 мэВ, A_2^{-1}-центра – 21 мэВ. E_i – энергия ионизации состояния, $E_{\rm opt}$ – энергия перехода с основного уровня на конкретное состояние, p_{lh} – вклад подзоны легких дырок в разложении волновой функции состояния

A_2^0-центр				A_2^{-1}-центр			
E_i, мэВ	$E_{\rm opt}$, мэВ	$\vert M\vert^2$, произв. ед.	p_{lh}, %	E_i, мэВ	$E_{\rm opt}$, мэВ	$\vert M\vert^2$, произв. ед.	p_{lh}, %
7.01	3.99	15	3	15.47	5.53	21	4.75
3.9	7.1	26	2	9.8	11.2	33	4
3.07	7.93	134	1	7.72	13.28	125	3
1.7	9.3	3	2	4.61	16.39	30	4
0.84	10.16	2	0.3	3	18.0	7	1
0.7	10.3	6	0.01	2.12	18.88	1	0.5
0.55	10.45	15	5	2.01	18.99	6	0.5
0.42	**10.58**	**43**	**47.5**	1.28	19.72	10	9.5
0.38	10.62	3	0.02	**1.1**	**19.9**	**40**	**50**
0.2	10.8	5	0.003	1.02	19.98	3	1
				0.85	20.15	5	0.5
				0.6	20.4	8	0.3

4. Результаты и обсуждение. Как уже отмечалось, в спектрах ФП эпитаксиальной пленки исследуемого образца $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ присутствуют две линии при 10 и 20 мэВ (рис. 1). Как и в работе [13], они связываются с фотовозбуждением соответственно нейтральных (A_2^0-центры) и однократно ионизованных (A_2^{-1}-центры) вакансий ртути. С ростом температуры наблюдается быстрое гашение обеих линий ФП, которое связано с резким ростом концентрации дырок в валентной зоне, что приводит к падению сигнала примесной ФП из-за уменьшения сопротивления образца (ср. [29]). Как видно на вставке на рис. 1, интенсивность линии 2 с ростом температуры падает заметно "медленнее", чем интенсивность линии 1. Такое поведение можно было бы объяснить ростом концентрации однократно ионизованных центров при ионизации нейтральных центров ("отрыве" первой дырки) с увеличением температуры, однако расчет не подтверждает такое предположение. На рисунке 3 показаны зависимости относительных концентраций нейтральных и однократно ионизованных вакансий ртути от температуры, рассчитанные с помощью уравнения электронейтральности [14]. При температурах до 15 K эти концентрации заметно не меняются, поэтому указанный механизм "превращения" A_2^0-центров в A_2^{-1}-центры с ростом температуры не должен оказывать какого-либо влияния на изменение соотношения интенсивностей линий 1 и 2 в рассматриваемом диапазоне температур.

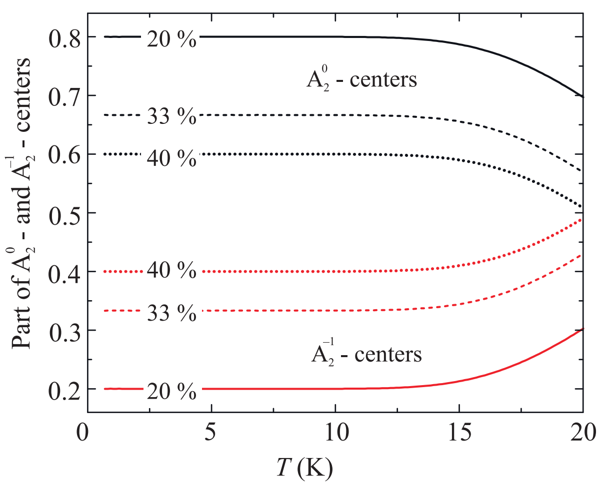

Рис. 3. (Цветной онлайн) Рассчитанные температурные зависимости относительных концентраций A_2^0- и A_2^{-1}-центров вакансий ртути в твердом растворе $Hg_{0.78}Cd_{0.22}Te$ p-типа при различных степенях компенсации (указаны в процентах)

Как уже отмечалось, из табл. 1 видно, что переходы на мелкие уровни с энергией ионизации 0.42 мэВ для A_2^0-центра и 1.1 мэВ для A_2^{-1}-центра и обладают в несколько раз большим квадратом матричного элемента, чем переходы на соседние возбужденные состояния. Насколько известно авторам, существование таких интенсивных переходов вблизи энергии ионизации акцепторов ранее в литературе не обсуждалось. Как показывают расчеты структуры волновых функций возбужденных состояний, для этих уровней доля подзоны легких дырок в разложении составляет около 50 %, в то время как для других уровней она оказывается не более 10 % (табл. 1). Таким образом, при качественном анализе эти уровни можно рассматривать как одни из нижних уровней акцепторов (т.е. состояний с большим матричным элементом перехода с основного состояния – см. табл. 1), связанных с подзоной легких дырок (при всей условности такого рассмотрения акцептора в вырожденной валентной зоне). Существование таких мелких уровней акцептора с большим матричным элементом оптического перехода из основного состояния не является уникальным свойством твердых растворов КРТ. Проведенные нами расчеты показали наличие такого уровня в спектре акцептора в GaAs с энергией ионизации 0.8 мэВ. Как оказалось, соответствующая линия ранее наблюдалась в спектре ФП высококачественной эпитаксиальной пленки GaAs : Zn на частоте 240 $см^{-1}$, что соответствует 30 мэВ (см. рис. 1 в [30]). Энергия связи примеси Zn GaAs составляет 30.8 мэВ [31]; таким образом, расстояние этой линии (не получившей интерпретации в работе [30]) от энергии континуума находится в хорошем согласии с расчетом.

Проведенные расчеты позволили объяснить нетипичную для "примесной" фотопроводимости форму спектра фотоотклика. Даже с учетом провалов сигнала около 15 и 19 мэВ, обусловленных поглощением HgTe-подобными и CdTe-подобными фононами соответственно [32], в спектрах ФП доминируют узкие линии, спадающие на масштабе 2 мэВ. В то же время полосы примесной ФП таких полупроводников, как Ge, Si и GaAs, связанные с переходами в непрерывный спектр, обычно имеют пологий коротковолновый фронт [33–37]. Вместе с тем в спектрах примесной ФП часто наблюдаются узкие линии, связанные с термической активацией носителей [28, 32, 38, 39], перешедших на возбужденные уровни под действием возбуждающего излучения, в зону. Как правило, такие линии значительно уже 1 мэВ, однако в случае твердого раствора КРТ естественно ожидать уширения таких особенностей за счет флуктуаций состава.

Таким образом, можно заключить, что линии 1 и 2 в спектрах ФП (рис. 1) связаны с переходами на мелкие уровни вакансии ртути (с энергиями связи 0.42 и 1.1 мэВ) с последующей термической активацией, а не с переходами непосредственно в континуум. Уже отмеченное выше изменение соотношения интенсивностей линий 1 и 2 с ростом температуры (см. вставку на рис. 1) объясняется разной энергией связи возбужденных состояний, с которых происходит активация. Выражение, описывающее вероятность фототермической ионизации мелких "примесных" состояний хорошо известно и в пределе низких температур сводится к экспоненциальной зависимости $\sim \exp(-E_i/kT)$, где E_i – энергия ионизации возбужденного состояния [29]. Энергия ионизации рассматриваемых возбужденных состояний составляет 0.42 и 1.1 мэВ A_2^{-1}- и A_2^{-1}-центров, что соответствует 5 и 13 K, что и объясняет изменение соотношения интенсивностей линий 1 и 2 в интервале температур измерений от 4 до 9 K.

Из таблицы 1 также можно заметить, что некоторые переходы на более глубокие возбужденные состояния обладают еще большим матричным элементом по сравнению с рассмотренными выше: в частности, переходы на третье по энергии состояние с энергией связи 3.07 мэВ для A_2^0-центра и 7.72 мэВ для A_2^{-1}-центра. Однако в диапазоне температур до 10 K вероятность термической активации с таких состояний очень низка, поэтому указанные переходы не проявляют себя в спектрах ФП.

5. Заключение. Расчеты энергетических спектров вакансий ртути – двойных акцепторов в твердых растворах КРТ позволили выявить как для нейтральных, так и для однократно ионизованных центров возбужденные состояния с малой энергией ионизации, сформированные преимущественно состояниями легких дырок. Оптическим переходам в такие состояния с основных состояний акцепторов соответствуют большие (по сравнению с переходами в соседние возбужденные состояния) значения матричных элементов, что позволяет связать с ними, а не с переходами в континуум, обнаруженные линии терагерцовой фотопроводимости твердых растворов КРТ. Последнее согласуется с относительно малой шириной наблюдаемых линий ФП и зависимостью их интенсивности от температуры. Необходимо отметить, что переходы в возбужденные состояния мелких центров редко удается наблюдать в твердых растворах, по-видимому, из-за сильного их "размытия", связанного с неоднородностью материала (см., например, [40]). Полученные в данной работе результаты создают предпосылки для развития дополнительного метода исследования вакансий ртути в структурах на основе HgCdTe с помощью фототермической ионизационной спектроскопии, которая обладает известными преимуществами как метод характеризации слаболегированных полупроводников [33].

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования # 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

1. A. Rogalski, Opto-Electronics Review **20**, 279 (2012).
2. D. L. Polla and C. E. Jones, J. Appl. Phys. **51**, 6233 (1980).

3. B. Li, Y. Gui, Z. Chen, H. Ye, J. Chu, S. Wang, R. Ji, and L. He, Appl. Phys. Lett. **73**, 1538 (1998).
4. S. H. Shin, M. Chu, A. H. B. Vanderwyck, M. Lanir, and C. C. Wang, J. Appl. Phys. **51**, 3772 (1980).
5. I. I. Izhnin, A. I. Izhnin, H. V. Savytskyy, O. I. Fitsych, N. N. Mikhailov, V. S. Varavin, S. A. Dvoretsky, Y. G. Sidorov, and K. D. Mynbaev, Opto-Electronics Review **20**, 375 (2012).
6. И. И. Ижнин, А. И. Ижнин, К. Д. Мынбаев, Н. Л. Баженов, Е. И. Фицыч, М. В. Якушев, Н. Н. Михайлов, В. С. Варавин, С. А. Дворецкий, ФТП **48**, 207 (2014).
7. К. Д. Мынбаев, А. В. Шиляев, Н. Л. Баженов, А. И. Ижнин, И. И. Ижнин, Н. Н. Михайлов, В. С. Варавин, С. А. Дворецкий, ФТП **49**, 379 (2015).
8. F. Gemain, I. C. Robin, M. De Vita, S. Brochen, and A. Lusson, Appl. Phys. Lett. **98**, 131901 (2011).
9. F. Gemain, I. C. Robin, and G. Feuillet, J. Appl. Phys. **114**, 213706 (2013).
10. A. K. Ramdas and S. Rodriguez, Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981).
11. R. F. Kirkman, R. A. Stradling, and P. J. Lin-Chung, J. Phys. C: Solid State Phys. **11**, 419 (1978).
12. Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, А. М. Кадыков, В. С. Варавин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, В. И. Гавриленко, F. Teppe, ФТП **49**, 1654 (2015).
13. V. V. Rumyantsev, D. V. Kozlov, S. V. Morozov, M. A. Fadeev, A. M. Kadykov, F. Teppe, V. S. Varavin, M. V. Yakushev, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretskii, and V. I. Gavrilenko, Semicond. Sci. Technol. **32**, 095007 (2017).
14. Т. А. Уаман Светикова, А. В. Иконников, В. В. Румянцев, Д. В. Козлов, В. И. Черничкин, А. В. Галеева, В. С. Варавин, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, С. В. Морозов, В. И. Гавриленко, ФТП **53**, 1297 (2019).
15. И. Д. Николаев, Т. А. Уаман Светикова, В. В. Румянцев, М. С. Жолудев, Д. В. Козлов, С. В. Морозов, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, В. И. Гавриленко, А. В. Иконников, Письма в ЖЭТФ **111**, 682 (2020).
16. A. Kastalsky and J. C. M. Hwang, Solid State Commun. **51**, 317 (1984).
17. В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, Д. М. Гапонова, А. В. Иконников, К. В. Маремьянин, С. В. Морозов, Ю. Г. Садофьев, S. R. Johnson, and Y.-H. Zhang, ФТП **39**, 30 (2005).
18. К. Е. Спирин, Д. М. Гапонова, К. В. Маремьянин, В. В. Румянцев, В. И. Гавриленко, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, ФТП **52**, 1482 (2018).
19. V. S. Varavin, V. V. Vasiliev, S. A. Dvoretsky, N. N. Mikhailov, V. N. Ovsyuk, Yu. G. Sidorov, A. O. Suslyakov, M. V. Yakushev, and A. L. Aseev, Proc. SPIE 5136, Solid State Crystals 2002: Crystalline Materials for Optoelectronics (2003).
20. П. А. Бахтин, С. А. Дворецкий, В. С. Варавин, А. П. Коробкин, Н. Н. Михайлов, И. В. Сабинина, Ю. Г. Сидоров, ФТП **38**, 1207 (2004).
21. N. O. Lipary, A. Baldereschi, and M. L. W. Thewalt, Solid State Commun. **33**, 277 (1980).
22. M. Said and M. A. Kanehisa, Phys. Stat. Sol. (b) **157**, 311 (1990).
23. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, and G. Landwehr, Phys. Rev. B **72**, 035321 (2005).
24. J. Sak, Phys. Stat. Sol. **27**, 521 (1968).
25. M. H. Engineer and N. Tzoar, Phys. Rev. B **5**, 3029 (1972).
26. B. Hönelage, U. Rössler, and U. Schöder, Phys. Rev. B **12**, 2355 (1975).
27. Д. В. Козлов, В. В. Румянцев, С. В. Морозов, А. М. Кадыков, М. А. Фадеев, H.-W. Hubers, В. И. Гавриленко, ФТП **52**, 1257 (2018).
28. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, М. (1960).
29. H. W. H. M. Jongbloets, M. J. H. van de Steeg, J. H. M. Stoelinga, and P. Wyder, J. Phys. C: Solid State Phys. **13**, 2139 (1980).
30. В. Я. Алешкин, А. В. Антонов, В. И. Гавриленко, Л. В. Гавриленко, Б. Н. Звонков, ЖЭТФ **136**, 543 (2009).
31. D. E. Hill, J. Appl. Phys. **41**, 1815 (1970).
32. D. N. Talwar and M. Vandevyver, J. Appl. Phys. **56**, 1601 (1984).
33. E. E. Haller and W. L. Hansen, Solid State Commun. **15**, 687 (1974).
34. C. Jagannath, Z. W. Grabowski, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. B **23**, 2082 (1981).
35. В. Н. Мурзин, *Субмиллиметровая спектроскопия коллективных и связанных состояний носителей тока в полупроводниках*, Наука, М. (1985).
36. В. В. Румянцев, С. В. Морозов, К. Е. Кудрявцев, В. И. Гавриленко, Д. В. Козлов, ФТП **46**, 1414 (2012).
37. В. Н. Шастин, Р. Х. Жукавин, К. А. Ковалевский, В. В. Цыпленков, В. В. Румянцев, Д. В. Шенгуров, С. Г. Павлов, В. Б. Шуман, Л. М. Порцель, А. Н. Лодыгин, Ю. А. Астров, Н. В. Абросимов, J. M. Klopf, H.-W. Hubers, ФТП **53**, 1263 (2019).
38. Sh. M. Kogan and T. M. Lifshits, Phys. Stat. Sol. (a) **39**, 11 (1977).
39. H. W. H. M. Jongbloets, J. H. M. Stoelinga, M. J. H. van de Steeg, and P. Wyder, Phys. Rev. B **20**, 3328 (1979).
40. M. Franz, K. Pressel, and P. Gaworzewski, J. Appl. Phys. **84**, 709 (1998).