Изв. АН Армянской ССР, Физика, 7, 361—367 (1972)

НЕПРЯМЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТОНКИХ КВАНТОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНКАХ

Э. М. КАЗАРЯН, Г. Л. МАИЛЯН, Р. Л. ЭНФИАДЖЯН

В работе исследуется край оптического поглощения в тонких полупроводниковых пленках при непрямых междузонных переходах с участием акустических и оптических фононов. Показано, что квантование поперечного движения электронов в пленке приводит к сильному изменению хода кривой поглощения. В случае акустических фононов получается линейная зависимость (у края) коэффициента поглощения от энергии падающего излучения со скачками в наклоне кривой поглощения при тех значениях энергии, при которых начинаются переходы между энергетически более удаленными поперечными подзонами. Для оптических фононов зависимость сложнее: в начале поглощения получается кривая, которая имеет у края корневую зависимость, затем на нее в указанных выше точках накладываются либо линейные, либо корневые функции. Если, кроме того, учесть экранировку (в случае оптических фононов), то в очень малой области у края корневая зависимость заменяется линейной. Найден период осцилляционной зависимости коэффициента поглощения от толщины пленки.

Наличие квантового размерного эффекта приводит к существенному изменению различных физических свойств кристаллов (см. [1]). Известно, что последний проявляется также в оптических свойствах при поглощении электромагнитных волн пленкой [2, 3, 4]. Исследование поглощения показало необходимость „точного“ учета энергетического состояния электрона в кристалле, в частности, двумерной зонной структуры. При учете последней в соответствии с особенностями двумерной структуры энергетических зон, как и в случае массивного образца, следует различать два типа междузонных переходов: переходы с участием лишь одного фотона (прямые переходы), и переходы, в которых наряду с поглощением фотона часть энергии и импульса передается какому-либо третьему телу (напр., фонону или какому-либо дефекту). Исследование поглощения в работах [3, 4] относится к прямым междузонным переходам. Целью данной работы является вычисление коэффициента поглощения при непрямых междузонных переходах в размерно квантованной полупроводниковой пленке с учетом взаимодействия электрона с акустическими и оптическими фононами. Вычисления проводятся обычным квантовомеханическим способом аналогично случаю массивного образца [5, 6].

Будем исходить из формулы [7]

$$\alpha = \frac{2\pi c\hbar^2}{N\hbar\omega} \cdot \frac{w}{A_0^2}, \qquad (1)$$

где N — показатель преломления, A_0 — амплитуда плоской световой волны, ω — частота света. Вероятность переходов w имеет вид

$$w(\hbar\omega)=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{i,f}|H'_{\alpha_i,\alpha_f}|^2\,\delta(\hbar\omega-E(\alpha_f)+E(\alpha_i)),\tag{2}$$

где α_i и α_f — квантовые числа, характеризующие соответственно начальные и конечные состояния системы. Направим ось z перпендикулярно к плоскости пленки. Будем считать, что в направлении оси z электрон находится в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, а в плоскости (x, y)—в поле двумерной решетки. По этой модели состояние электрона в пленке характеризуется номером n подзон, возникающих из-за квантования поперечного движения, зонным индексом l и двумерным волновым вектором $\vec{k}$, характеризующими состояние электрона в плоскости пленки.

Предполагая, что пленка находится на подложке, обладающей такими же упругими свойствами, что и пленка, мы пренебрежем квантованием фононного спектра [1]. Соответственно состояние фонона будет определяться трехмерным волновым вектором $\vec{q}$.

Рассматривая электрон-фононное взаимодействие как возмущение, имеем следующий матричный элемент для непрямых переходов (учитывая, что продольный импульс фотона намного меньше импульса электрона, $s_\parallel \ll k$ (см. [7])):

$$<l_f,\ \vec{k}_f,\ n_f|H'|\ l_i,\ \vec{k}_i,\ n_i> =\tag{3}$$

$$=\sum_{l_\alpha n}\frac{<l_f,\ \vec{k}_f,\ n_f|H_0|\ l_\alpha,\ \vec{k}_f,\ n><l_\alpha,\ \vec{k}_f,\ n_i|H_{ph}|\ l_i,\ \vec{k}_i,\ n_i>}{E(l_i,\ \vec{k}_i,\ n_i)-E(l_\alpha,\ \vec{k}_f,\ n)}+$$

$$+\sum_{l_\beta,\ n'}\frac{<l_f,\ \vec{k}_f,\ n_f|H_{ph}|\ l_\beta,\ \vec{k}_i,\ n'><l_\beta,\ \vec{k}_i,\ n'\ |H_0|\ l_i,\ \vec{k}_i,\ n_i>}{E(l_f,\vec{k}_f,\ n_f)-E(l_\beta,\ \vec{k}_i,\ n')}.$$

Здесь H_0—оператор взаимодействия электрона со световой волной, H_{ph}— оператор электрон-фононного взаимодействия.

Далее ограничимся двухзонным приближением, т. е. будем считать, что l принимает два значения c и v. При этом для „оптического" матричного элемента имеем

$$|<c,\ \vec{k},\ n'|\ H_0\ |v,\ \vec{k},\ n>|^2\approx\left(\frac{e}{m_0\,c}\right)^2 A_0^2\,a_\rho^2\,m_0\,f_{cv}E_g\,\chi_{n'n}(s_zL),\tag{4}$$

где

$$\chi_{n'n}(s_z\,L)=\frac{16\,\pi^4\,(s_z\,L)^2\,(n'n)^2\,|(-1)^{n'+n}\cdot e^{-is_zL}-1|^2}{[\pi^2\,(n'+n)^2-(s_zL)^2]^2[\pi^2\,(n'-n)^2-(s_zL)^2]^2}.\tag{5}$$

Здесь s_z—поперечный импульс фотона, a_ρ—проекция вектора поляризации на плоскость пленки. Предполагая падение света нормальным к плоскости пленки, положим $a_\rho^2=1$. Интересуясь областью частот вблизи края поглощения, при вычислении (4) мы ввели постоянную силу осциллятора f_{cv} и заменили разность $E(c, \vec{k}) - E(v, \vec{k})$ постоянным значением E_g, равным расстоянию между границами зон в центре зоны Бриллюэна.

Далее, для матричных элементов, описывающих электрон-фононное взаимодействие, имеем:

а) Акустические фононы ($\hbar\omega_{\vec{q}} \ll k_0 T$),

$$|\langle \vec{k}', n'; N_{\vec{q}} \pm 1 | H_s | \vec{k}, n; N_{\vec{q}} \rangle|^2 = \frac{C_1^2 k_0 T}{2C_s^2 \rho} \chi_{n'n}(q_z L), \tag{6}$$

где C_1—постоянная деформационного потенциала, C_s—скорость звука в кристалле, ρ—плотность кристалла. При $n' = n$ формула (6) согласуется с аналогичной формулой работы [8].

б) Оптические фононы ($\hbar\omega_0 \gg k_0 T$),

$$|\langle \vec{k}', n'; N_{\vec{q}} - 1 | H_{opt} | \vec{k}, n; N_{\vec{q}} \rangle|^2 = \frac{4\pi^2 Z^2 e^4}{a^6 \rho\omega_0 q^2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_0 T}\right) \cdot \chi_{n'n}(q_z L), \tag{7}$$

где a—постоянная решетки. В формуле (7) мы пренебрегли дисперсией оптических фононов, т. е. $\omega_{\vec{q}} = \omega_0$.

1. Коэффициент поглощения при непрямых переходах в случае акустических фононов

В случае акустических фононов будем считать, что двумерная зона проводимости кроме основного минимума (в точке $\vec{k}=0$) имеет второй сдвинутый относительно точки $\vec{k}=0$ минимум, который энергетически ниже основного (полученные результаты нетрудно будет обобщить на случай, когда второй минимум выше основного минимума). В соответствии с этим в формулах будут фигурировать две массы, характеризующие зону проводимости, m_c и m_c', где первая соответствует минимуму в точке $\vec{k}=0$, вторая — второму минимуму. Ширину запрещенной зоны будем обозначать через E_g' (введенная выше величина E_g в данном случае больше E_g').

Тогда с помощью формул (1) —(6) легко получаем следующее выражение для коэффициента поглощения:

$$\alpha = 4 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{f_{cv}}{N} \frac{C_1^2 m_c' m_v}{\hbar^2 C_s^2 \rho m_0 L^2} \sum_{m, n} \frac{\hbar\omega - E_g' - \varepsilon_c' m^2 - \varepsilon_v n^2}{\hbar\omega} \times$$

$$\times \theta(\hbar\omega - E_g' - \varepsilon_c' m^2 - \varepsilon_v n^2) \sum_{n'} \chi_{n'n}(s_z L) \times$$

$$\times \frac{(\delta_{mn'} + 2) E_g k_0 T}{(E_g + \varepsilon_c n'^2 + \varepsilon_v n^2 - \hbar\omega)^2}, \tag{8}$$

где

$$\varepsilon_c' \equiv \varepsilon_c\,(m_c'),\ \ \varepsilon_l = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_l L^2}.$$

При выводе (8) учитывается, что энергетические знаменатели в (3) приближенно равны $E_g + \varepsilon_c n'^2 + \varepsilon_v n^2 - \hbar\omega$, а также пренебрегается энергией акустического фонона по сравнению с энергией электрона.

Так как $s_z L \lesssim 1$, то в промежуточных „оптических" переходах наиболее вероятны переходы между ближайшими (по номеру) поперечными подзонами (см. [3]). Для простоты сначала мы исследуем предельный случай $s_z L \to 0$, тогда

$$\alpha = 4\frac{e^2}{\hbar c}\frac{f_{cv}}{N}\frac{C_1^2 m_r' m_v}{\hbar^2 C_s^2 \rho m_0 L^2}\sum_{m,\,n}(\delta_{mn}+2)\times \tag{9}$$

$$\times\,\theta\,(\hbar\omega - E_g' - \varepsilon_c' m^2 - \varepsilon_v n^2)\,\frac{E_g k_0 T\,(\hbar\omega - E_g' - \varepsilon_c' m^2 - \varepsilon_v n^2)}{\hbar\omega\,(E_g + \varepsilon_c n^2 + \varepsilon_v n^2 - \hbar\omega)^2}.$$

Пусть $\hbar\omega - E_g'$ настолько мала, что в сумме по m и n в (9) отличен от нуля только первый член с $m = n = 1$. Как видим, при этом у края имеем линейную зависимость α от $\hbar\omega - E_g'$ (точнее, эту зависимость можно считать линейной, пока $\hbar\omega \ll E_g + \varepsilon_c + \varepsilon_v$). Поглощение в этой области энергий соответствует переходам из первой поперечной подзоны валентной зоны в первую подзону зоны проводимости. При дальнейшем увеличении $\hbar\omega - E_g'$ из-за наличия θ-функции в (9) становятся возможными переходы между другими подзонами, например, при $\hbar\omega - E_g' > \varepsilon_c' + \varepsilon_v \cdot 2^2$ уже возможны переходы из второй подзоны валентной зоны. Итак, при постепенном увеличении $\hbar\omega - E_g'$ наклон кривой поглощения претерпевает скачки при энергиях, соответствующих началу переходов между энергетически более удаленными подзонами. Причем наличие множителя $\delta_{mn}+2$ приводит к тому, что тангенсы углов, на которые меняется наклон, пропорциональны либо 2, либо 3, в зависимости от того, какие переходы вступают в силу, с $m \neq n$ или $m = n$. Качественно картина не меняется и при $s_z L \neq 0$. При этом опять получится линейная зависимость со скачками наклона в тех же точках, но углы скачков будут иными (ср. формулы (8) и (9)).

Как и следовало ожидать, при фиксированной энергии фотона также будем иметь осцилляционную зависимость α от L. Для расстояния $L_2 - L_1$ между первыми двумя максимумами функции $\alpha\,(L)$ получается формула

$$L_2^2 - L_1^2 \approx \frac{3\,\pi^2\hbar^2}{2m_v\,(\hbar\omega - E_g')}. \tag{10}$$

2. Коэффициент поглощения при непрямых переходах в случае оптических фононов

В случае оптических фононов будем считать, что двумерный минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны расположены в точке $\vec{k}=0$. Наша задача—исследовать „хвост“ поглощения в тонких пленках.

С помощью формул (1)—(5) и (7) для коэффициента поглощения получим (см. также [9])

$$\alpha=(2\pi)^4 Z^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\frac{f_{cv}}{N}\exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right)\frac{2E_g}{\hbar\omega}\frac{c^2\hbar^5}{a^6\rho\omega_0 m_0}\times$$
$$\times\sum_{m,n}\frac{1}{(E_g+\varepsilon_c m^2+\varepsilon_v n^2-\hbar\omega)^2}\sum_{n'}\chi_{n'n}(s_zL)\,I_{nn'm}(\hbar\omega), \tag{11}$$

где

$$I_{nn'm}(\hbar\omega)=\begin{cases}\dfrac{m_c m_v}{2\pi^4\hbar^4}\cdot\dfrac{n'^2+m^2}{(n'^2-m^2)^2}B\cdot\theta(B),\ n'\neq m, & (12)\\[2ex] \dfrac{m_c\,m_v}{8\pi^3\hbar^3 L}\sqrt{2B}\,\theta(B)\displaystyle\int_0^1\frac{F\left(\frac{\pi}{2};\lambda(y)\right)}{\sqrt{m_c(1-y)}+\sqrt{m_v y}}dy,\ n'=m, & \end{cases}$$

$$\tag{13}$$

а $B\equiv\hbar\omega+\hbar\omega_0-E_g-\varepsilon_c m^2-\varepsilon_v n^2$; $F\left(\frac{\pi}{2};\lambda\right)$—полный эллиптический интеграл первого рода, где

$$\lambda=\sqrt{2}\ \ [m_c\ m_v\ y\,(1-y)]^{1/4}\cdot[\sqrt{m_c(1-y)}+\sqrt{m_v y}\,]^{-1}.$$

Интегрирование в формулах (11)—(13) было проведено при условии $q_\parallel L<1$, поэтому они справедливы при $B<\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m_l\ L^2}$. При таком ограничении на величину B формула (11) позволяет проследить за ходом кривой поглощения вблизи края, а также после скачков наклона кривой поглощения.

Как и в случае акустических фононов, сначала исследуем предельный случай $s_zL\to 0$:

$$\alpha=(2\pi)^4 Z^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\frac{f_{cv}}{N}\exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_0T}\right)\cdot\frac{2E_g}{\hbar\omega}\times$$
$$\times\frac{c^2\hbar^5}{a^6\rho\omega_0 m_0}\sum_{m,n}\frac{I_{nnm}(\hbar\omega)}{(E_g+\varepsilon_c m^2+\varepsilon_v n^2-\hbar\omega)^2}. \tag{14}$$

Из формул (12)—(14) следует, что скачки наклона функции $\alpha=\alpha(\hbar\omega-E_g+\hbar\omega_0)$ происходят в тех же точках, что и в случае акустических фононов. Поведение функции после таких точек определяется появляющимся из-за θ-функции новым членом в сумме $\sum_{m,n}$, который вблизи этих точек возрастает либо как корень (см. формулу (13)), либо как линейная функция (формула (12)) от $\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_0$, в зависимости от того, какой переход в данной точке вступает в силу, с $m = n$ или $m \neq n$. Аналогично ведет себя функция $\alpha = \alpha\,(\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_0)$ и при $s_z L \neq 0$ (формула (11)).

Заметим, что до сих пор мы не учитывали экранирования в матричных элементах взаимодействия электрона с оптическим фононом. Учет экранирования привел бы к тому, что в знаменателях матричных элементов появилось бы дополнительное слагаемое $(\lambda L)^2$. Так как параметр экранирования λ мал ($\lambda L \ll 1$), то его учет заметно повлиял бы только на результаты, полученные при $n' = m$, $q_\parallel L \ll 1$. Итак, при $B \ll \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2\, m_l L^2}$ вместо формулы (13) будем иметь

$$I_{nn'm}(\hbar\omega) = \frac{m_c m_v}{2\pi^2\hbar^4} \frac{1}{(\lambda L)^2} B\,\theta(B). \tag{15}$$

В случае оптических фононов также имеем осцилляционную зависимость α от L. Для $L_2 - L_1$ имеем соотношение

$$L_2^2 - L_1^2 \approx \frac{3\pi^2\hbar^2}{2m_v\,(\hbar\omega - E_g + \hbar\omega_0)}. \tag{16}$$

Аналогично можно найти ΔL для следующих максимумов.

В заключение заметим, что примененное нами приближение эффективной массы, вообще говоря, пригодно для подзон с небольшими n ($n < 10$). Последнее обстоятельство необходимо иметь в виду при практическом использовании всех полученных формул, где идет суммирование по подзонам.

Ереванский государственный университет

Поступила 27.III.1972

ЛИТЕРАТУРА

1. *Б. А. Тавгер, В. Я. Демиховский*, УФН, 96, 61 (1968).
2. *Н. С. Рытова*, ФТТ, 8, 2672 (1966).
3. *В. Г. Коган, В. З. Кресин*, ФТТ, 11, 3250 (1969).
4. *Э. М. Казарян, Р. Л. Энфиаджян*, ФТП, 5, 2002 (1971).
5. *J. Bardeen, F. Blatt, L. Hall*, Proceedings of Atlantic City Conference on Photoconductivity, New York, London, 1956, p. 146.
6. *W. P. Dumke*, Phys. Rev., 108, 1419 (1957).
7. Оптические свойства полупроводников, Сб. статей под ред. Р. Уиллардсона и А. Бира. Изд. Мир, стр. 166, 1970.
8. *В. Я. Демиховский, Б. А. Тавгер*, ФТТ, 6, 960 (1964).
9. *М. Д. Блох, В. А. Маргулис, Б. А. Тавгер*, ФТП, 5, 1335 (1971).

ՈՉ ՈՒՂԻՂ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԲԱՐԱԿ ՔՎԱՆՏԱՑՎԱԾ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐՈՒՄ

Է. Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Գ. Լ. ՄԱՅԻԼՅԱՆ, Ռ. Լ. ԷՆՖԻԱՋՅԱՆ

Աշխատանքում հետազոտված է կիսահաղորդչային բարակ թաղանթներում օպտիկական կլանման եզրը ոչ ուղիղ անցումների համար ձայնային և օպտիկական ֆոնոնների մասնակցությամբ։ Ցույց է տրված, որ էլեկտրոնների ընդլայնական շարժման քվանտացումը բերում է կլանման գործակցի ուժեղ փոփոխմանը։ Ձայնային ֆոնոնների դեպքում կլանման գործակցի համար ստացվել է գծային կախում ընկնող լույսի էներգիայից, ընդ որում կլանման կորի թեքությունը թռիչքաձև փոխվում է էներգետիկորեն ավելի հեռու գտնվող ընդլայնական մակարդակների միջև անցումներին համապատասխանող էներգիայի արժեքներում։ Օպտիկական ֆոնոնների դեպքում կախումը ավելի բարդ է՝ ստացվող կորի կախումը էներգիայից եզրի մոտ տրվում է քառակուսի արմատ օրենքով, այնուհետև վերևում նշված էներգիայի արժեքներում վերադրվում են գծային կամ քառակուսի արմատին համեմատական ֆունկցիաներ։ Էկրանացումը հաշվի առնելիս (օպտիկական ֆոնոնների համար) եզրի մոտ փոքր տիրույթում քառակուսի արմատ կախումը փոխվում է գծայինով։ Ստացված է թաղանթի հաստությունից կլանման գործակցի օսցիլյացիոն կախման պարբերությունը։

INDIRECT TRANSITIONS IN THIN QUANTIZED SEMICONDUCTOR FILMS

E. M. KAZARIAN, G. L. MAYILIAN, R. L. ENFIADZHIAN

The edge of the optical absorption by indirect interband transitions, due to acoustic and optical phonons, is investigated in thin semiconductor films. It is shown, that the quantization of the transverse motion of electrons in a film leads to the essential change of the absorption function. In the case of acoustic phonons the absorption near the edge is a linear function of incident light energy with jumps in the slope of absorption curve at energy values, at which transitions begin between energetically more remote transverse subbands.

The case of optical phonons is more complicated: at the beginning of the absorption one has the curve, which is proportional at the edge to the square root of light energy with following superimposition in abovementioned points of linear or square root function of the energy. If one takes into account the screening (for optical phonons), the square root function is replaced by linear function closely to the edge. The period of oscillations of the absorption as function of the film thickness is found as well.