

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ С ДИСЛОКАЦИЯМИ ПРИ НЕПРЯМЫХ МЕЖЗОННЫХ ПЕРЕХОДАХ

А.А. КИРАКОСЯН, М.К. КУМАШЯН, К.А. МХОЯН, А.А. САРКИСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 22 мая 1995 г.)

Предложен новый механизм поглощения света, обусловленного непрямыми межзонами переходами при взаимодействии носителей заряда с прямолинейными дислокациями. Рассчитан коэффициент поглощения, частотная зависимость которого дается множителем $(\hbar\omega - \epsilon_g)^{3/2}$ (ω — частота света, ϵ_g — ширина запрещенной зоны полупроводника) и проведено сравнение с коэффициентом поглощения при фононном механизме.

Наличие нарушений периодичности кристаллической структуры является необходимым условием при межзонном поглощении света в полупроводниках с непрямой зонной структурой [1]. При этом основное изменение энергии носителя заряда (НЗ) происходит в результате взаимодействия с фотоном, а изменение квазиимпульса — вследствие взаимодействия с нарушением структуры — "третьим телом". Впервые такой механизм межзонного поглощения света с участием фононов в качестве "третьего тела" был предложен в [2]. Теоретически рассмотрены не прямые переходы при рассеянии НЗ на плазмонах [3], на поверхностных шероховатостях размерно квантованных пленок [4] и проволок [5].

В данной работе предложен новый механизм для не прямых оптических переходов при рассеянии НЗ на прямолинейных дислокациях и рассчитан коэффициент поглощения монохроматической световой волны, обусловленного такими переходами.

Вспользуемся известным выражением для коэффициента поглощения [6]:

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi c \hbar^2}{N \hbar \omega} \cdot \frac{W}{|A_0|^2} \quad (1)$$

где W — вероятность межзонных переходов в единицу времени и в

единице объема, N —показатель преломления среды, ω —частота, A_0 —амплитуда векторного потенциала электромагнитной волны, c — скорость света в вакууме.

В случае непрямых переходов из полностью заполненной валентной зоны в пустую зону проводимости для вероятности переходов во втором приближении теории квантовых переходов имеет место выражение [7]

$$W = \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_{i f m} \frac{|M_{fm}|^2 \cdot |M_{mi}|^2}{(\epsilon_m - \epsilon_i - \hbar\omega)^2} \cdot \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega), \quad (2)$$

где V — объем системы, M_{fm} — матричный элемент взаимодействия НЗ с дислокацией для перехода из промежуточного состояния (m) в конечное состояние (f), M_{mi} — матричный элемент взаимодействия НЗ с электромагнитным полем для перехода из начального состояния (i) в промежуточное, $\epsilon_i, \epsilon_m, \epsilon_f$ — энергии НЗ в соответствующих состояниях, а наличие дельта-функции обеспечивает выполнение закона сохранения энергии для всего перехода в целом.

Предположим, что максимум валентной зоны находится в центре зоны Бриллюэна $k=0$, а минимум зоны проводимости—в точке $k=k_0$.

Рассмотрим сначала переходы, когда при поглощении кванта энергии $\hbar\omega$ электрон из области $k \approx 0$ валентной зоны совершает прямой "оптический" переход в промежуточное виртуальное состояние в области $k' \approx 0$ зоны проводимости, откуда, провзаимодействовав с дислокацией, переходит в конечное состояние $k'' \approx k_0$ в области минимума зоны проводимости (переходы " $v \rightarrow c \rightarrow c''$ ").

Воспользовавшись выражением для гамильтониана взаимодействия электрона с электромагнитной волной [6], "оптический" матричный элемент перехода можно представить в форме

$$M_{mi} \equiv M_{cv}(k) = \frac{e}{m_0 c} A_0 \cdot e p_{cv}(k), \quad (3)$$

где m_0 — масса свободного электрона, e — вектор поляризации свето-

вой волны, $p_{cv}(\mathbf{k})$ — матричный элемент перехода для импульса.

Как известно (см., например, [8]), энергия взаимодействия НЗ с прямолинейной дислокацией зависит только от полярных координат в плоскости, перпендикулярной оси дислокации (ось z). Ввиду такой двумерности матричный элемент рассеяния электрона, рассчитанный на нормированных на объем образца плоских волнах в зоне проводимости, отличен от нуля только для переходов с сохранением компоненты волнового вектора электрона вдоль оси дислокации, т.е., имеет место "правило отбора"

$$k'_z = k_z. \quad (4)$$

Таким образом, матричный элемент взаимодействия электрона с дислокацией можно представить в виде

$$M_{jm} \equiv M_{cr} = \frac{2\pi}{S} V(\mathbf{q}_\perp) \cdot \delta_{k_z, k'_z}, \quad (5)$$

где S — площадь образца, δ_{k_z, k'_z} — символ Кронекера, $\mathbf{q}_\perp = \mathbf{k}'_\perp - \mathbf{k}_\perp$ — изменение волнового вектора электрона при рассеянии,

$$V(\mathbf{q}_\perp) = \int \exp(i \mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) V(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}_\perp \quad (6)$$

— двумерный фурье-образ энергии взаимодействия НЗ с дислокацией.

Входящий в (2) энергетический знаменатель можно представить в виде

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega = \varepsilon_0 - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}, \quad (7)$$

где ε_0 — ширина запрещенной зоны в центре зоны Бриллюэна, m_c (m_v) — эффективная масса электрона (дырки). При исследовании края поглощения, когда $\hbar\omega \geq \varepsilon_g$ (ширины запрещенной зоны), учитывал, что $\varepsilon_0 > \varepsilon_g$, в (7) можно пренебречь кинетическими энергиями электрона и дырки по сравнению с разностью $\varepsilon_0 - \hbar\omega$.

Предположим, что изоэнергетические поверхности энергии вблизи минимумов имеют вид эллипсоидов вращения. Тогда аргумент дельта-функции в (2) можно записать в форме

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}') - \varepsilon_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega = \varepsilon_g - \hbar\omega + \frac{\hbar^2(\mathbf{k}'_{\perp} - \mathbf{k}_{0\perp})^2}{2m_{\perp}} + \frac{\hbar^2 k_z'^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\perp}^2}{2m_v} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_v}, \quad (8)$$

где m_{\perp}, m_{\parallel} — поперечная и продольная эффективные массы электрона в точке \mathbf{k}_0 , соответственно, m_v — эффективная масса дырки в точке $\mathbf{k} = 0$. В (8) учтено, что согласно правилу отбора (4), $k_{0z} = 0$, т.е. рассеяние происходит на дислокациях, ось которых направлена перпендикулярно вектору $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_{0\perp}$.

Перейдем к расчету коэффициента поглощения.

В случае "разрешенных" переходов, когда $|\mathbf{e}\mathbf{p}_{cv}(0)| \neq 0$, выражение для вероятности переходов можно представить в виде

$$W_1 = \frac{B \cdot |A_0|^2}{(\varepsilon_0 - \hbar\omega)^2} \int dk_z d\mathbf{k}_{\perp} d\varphi \cdot I(\varphi), \quad (9)$$

где

$$B = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar S m_0^2 c^2} \cdot |\mathbf{e}\mathbf{p}_{cv}(0)|^2, \quad (10)$$

$$I(\varphi) = \frac{2m_{\parallel}}{\hbar^2} \int k'_{\perp} dk'_{\perp} \left| V(\mathbf{k}'_{\perp} - \mathbf{k}_{\perp}) \right|^2 \cdot \delta \left\{ (\mathbf{k}'_{\perp} - \mathbf{k}_{0\perp})^2 + \frac{m_{\perp}}{m_v} \mathbf{k}_{\perp}^2 - \frac{2m_{\perp}}{\hbar^2} A \right\}, \quad (11)$$

$$A = \hbar\omega - \varepsilon_g - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = a_0 - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}, \quad (12)$$

$$A_0 = \hbar\omega - \varepsilon_g, \quad (13)$$

$$m^{*-1} = m_v^{-1} + m_{\parallel}^{-1} \quad (14)$$

В (11) угол φ отсчитывается от направления \mathbf{k}_0 . После несложных вычислений для $I(\varphi)$ получим выражение

$$I(\varphi) \equiv |V(k_0)|^2 \cdot (\varphi_0^2 - \varphi^2)^{-1/2}, \quad (15)$$

где

$$\varphi_0 = \left(\frac{2m_{\perp}}{\hbar^2 k_0^2} \right)^{1/2} \left(A - \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_v} \right)^{1/2} \quad (16)$$

При выводе (15) было предположено, что дислокационный потенциал обладает цилиндрической симметрией, вследствие чего его фурье-образ зависит только от модуля передаваемого импульса. Из (16) и (12) следует, что при данной частоте возможные значения величины k_z находятся в области

$$0 \leq |k_z| \leq \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} A_0 \right)^{1/2} \quad (17)$$

После выполнения интегрирований и учета всех рассеивающих дислокаций в образце, для коэффициента поглощения при "разрешенных" переходах получаем:

$$\alpha_{\text{раз}}(\omega) = D \cdot n_D |V(k_0)|^2 (\hbar\omega - \epsilon_g)^{3/2} \quad (18)$$

где n_D — плотность рассеивающих дислокаций, а коэффициент

$$D = \frac{2\pi e^2 r |e p_{cv}(0)|^2 m_{\perp}}{m_0^2 c N \omega \hbar^2 (\epsilon_0 - \hbar\omega)^2} \left(\frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{\gamma^{3/2}}{(1+\gamma)^{1/2}} \quad (19)$$

— медленно меняющаяся у края поглощения функция частоты. В (19) введены обозначения: r — число долин, $\gamma = m_v / m_{II}$.

Следует заметить, что помимо рассмотренных выше переходов " $v \rightarrow c \rightarrow c'$ ", имеют место также переходы, когда электрон из точки k_0 валентной зоны совершает прямой переход в минимум зоны проводимости, а образовавшаяся при этом дырка, взаимодействуя с дислокацией, переходит в область максимума валентной зоны $k \approx 0$ (переходы " $v \rightarrow c \rightarrow v'$ "). Такие переходы можно учесть, включая в выражение для D (19) слагаемое, пропорциональное величине $[\epsilon_g(k_0) - \hbar\omega]^{-2}$, где $\epsilon_g(k_0)$ — ширина запрещенной зоны в точке k_0 . В большинстве полупроводников $\epsilon_g(k_0) > \epsilon_0$, поэтому при исследовании края поглощения ($\hbar\omega \geq \epsilon_g$) вкладом " $v \rightarrow c \rightarrow v'$ " переходов в коэффициент поглощения можно пренебречь.

При рассеянии на фонах коэффициент поглощения для "разрешенных" переходов вблизи края поглощения пропорционален $(\hbar\omega - \epsilon_g \pm E_{ph})^2$, где E_{ph} — энергия фона. Изменение частотной зависимости коэффициента поглощения для рассматриваемого

дислокационного механизма есть следствие сохранения составляющей квазиимпульса электрона вдоль оси дислокации в акте рассеяния.

Следует заметить, что как и при фононном механизме рассеяния, частотная зависимость коэффициента поглощения получена в пренебрежении экситонными эффектами [6].

Согласно (18), коэффициент поглощения пропорционален плотности дислокаций n_D и квадрату двумерного фурье-образа энергии взаимодействия, характеризующего интенсивность взаимодействия НЗ с дислокацией.

При рассеянии на краевых дислокациях, описываемых в рамках модели экранированной заряженной нити, потенциальная энергия электрона в поле дислокации дается выражением [9]

$$V(r_{\perp}) = \frac{2e^2 f}{\epsilon a} K_0(\lambda r_{\perp}) \equiv v_0 K_0(\lambda r_{\perp}), \quad (20)$$

где f — коэффициент заполнения связей, ϵ — диэлектрическая постоянная полупроводника, a — постоянная решетки, $K_0(x)$ — модифицированная функция Бесселя второго рода нулевого порядка, $\lambda = (4\pi e^2 n / k_B T \epsilon)^{1/2}$ — параметр экранирования, n — концентрация НЗ, T — температура.

С помощью (20), (6) и (18) для коэффициента поглощения при рассеянии на краевых дислокациях получим

$$\alpha_{\text{ед}}(\omega) = D \cdot n_D \frac{v_0^2}{(\lambda^2 + k_0^2)^2} (\hbar\omega - \epsilon_r)^{3/2}. \quad (21)$$

Температурная зависимость $\alpha_{\text{ед}}(\omega)$, помимо слабой зависимости $\epsilon_r(T)$, обусловлена в основном множителем f^2 , поскольку, как правило, $k_0 \sim a^{-1}$ и при физически разумных значениях n и T имеет место неравенство $\lambda \ll k_0$.

При рассеянии на винтовых дислокациях, описываемых потенциалом [10]

$$V(r_{\perp}) = \frac{\alpha}{r_{\perp}} \quad (22)$$

где α — феноменологическая постоянная, для коэффициента

поглощения получается выражение

$$\alpha_B(\omega) = D \cdot n_D \frac{\alpha^2}{k_0^2} (\hbar\omega - \epsilon_g)^{3/2} \quad (23)$$

Как следует из (21) и (23), из-за сильной зависимости коэффициента поглощения от величины k непрямые переходы затруднены ввиду необходимости передачи значительных ($\sim \hbar k_0$) квазиимпульсов в акте рассеяния.

Сравним коэффициенты поглощения при рассеянии НЗ на краевых дислокациях и на фононах. Воспользуемся выражением для коэффициента поглощения при рассеянии на фононах [11] (случай поглощения фонона) и выражением (21)

$$\frac{\alpha_{\text{ед}}}{\alpha_{ph}} = B \cdot \left(\frac{\psi_0}{E_1}\right) \cdot \frac{n_D a^2}{N_{ph}} \cdot \left(\frac{E_{ph}}{\hbar^2 / Ma^2}\right)^{1/2} \frac{\left(\frac{\hbar\omega - \epsilon_g}{E_{ph}}\right)^{3/2}}{\left(\frac{\hbar\omega - \epsilon_g}{E_{ph}} + 1\right)^2} \quad (24)$$

где E_1 — постоянная потенциала деформации, N_{ph} — среднее число фононов, $M = \rho a^3$ — масса элементарной ячейки, ρ — плотность полупроводника,

$$B = \frac{12\pi^2 \gamma^2}{r(1+\gamma)^{1/2} (k_0 a)^6} \left(\frac{2M}{m_v}\right)^{1/2} \quad (25)$$

Для германия ($m_v = 0,33m_0$, $E_1 \approx 3 \text{ эВ}$, $r = 4$, $\nu_0 \approx 0,03 \text{ эВ}$, $\gamma = 0,2075$, $k_0 a = \pi\sqrt{3}$, $a = 5,657 \text{ \AA}$, $\rho = 5,32 \text{ г/см}^3$), в случае поглощения НЗ поперечного акустического фонона с энергией $E_{ph} = 7,7 \text{ мэВ}$ [11], отношение (24) будет порядка единицы для энергии кванта падающего излучения $\hbar\omega \leq \epsilon_g + E_p$ (испускание отсутствует) при температуре

$$T_0 = \frac{89}{11 + \ln \frac{n_{D \text{ max}}}{n_D}} (K), \quad (26)$$

где $n_{D_{\max}} = 10^{13} \text{ см}^{-2}$. При $n_D / n_{D_{\max}} \approx 10^{-6}$ $T_0 \approx 3,6 \text{ К}$. В случае поглощения с участием продольного акустического фонона с энергией $E_p = 27 \text{ мэВ}$ [11], при тех же концентрациях дислокаций для температуры получаем $T_0 \approx 12,9 \text{ К}$.

Ввиду слабой (логарифмической) зависимости T_0 от концентрации дислокаций можно утверждать, что дислокационный механизм непрямого поглощения может конкурировать с фононным механизмом только при температурах $T \lesssim T_0$.

Для "запрещенных" переходов, когда $|\epsilon_{cv}(0)| = 0$, вероятность межзонных переходов пропорциональна величине $|\epsilon_{cv}(k)|^2 = k^2 \cdot \left| \nabla_{-k} \epsilon_{cv}(k) \right|_{k=0}^2$, что приводит к следующему выражению для коэффициента поглощения:

$$\alpha_{\text{зап}} = D' \cdot n_D |V(k_0)|^2 \cdot (\hbar\omega - \epsilon_g)^{5/2} \quad (27)$$

где D' — медленно меняющаяся у края поглощения известная функция частоты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р.Смит. Полупроводники. М., Мир, 1982.
2. I.Bardeen, F.Blatt, L.H.Hall. Proceedings of Atlantic City Photoconductivity Conference, New York, 146 (1954).
3. Е.М.Казарян. Physics Letters, 19, 471 (1965).
4. А.А.Киракосян, Э.А.Саркисян. ФТП, 11, 1629 (1977).
5. А.А.Киракосян, Э.А.Саркисян. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 13, 444 (1978).
6. Оптические свойства полупроводников. Под ред. Р.Уилларсона и А.Бира, М., Мир, 1970.
7. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
8. Дж.Хирт, Й.Лоте. Теория дислокаций, М., Атомиздат, 1972.
9. В.Л.Бонч-Бруевич, В.Б.Гласко. ФТТ, 3, 36 (1961).
10. В.Л.Бонч-Бруевич. ФТТ, 3, 47 (1961).
11. Т.Мосс, Г.Баррел, Б.Эллис. Полупроводниковая оптоэлектроника. М., Мир, 1976.

LIGHT ABSORPTION IN A SEMICONDUCTOR, CONTAINING DISLOCATIONS, IN NONDIRECT INTERBAND TRANSITIONS

A. A. KIRAKOSIAN, M. K. KOUMASHIAN, K. A. MKHOIAN, H. A. SARGSIAN

A new mechanism of the light absorption caused by interaction of charge carriers with the line dislocations in the nondirect interband transitions is suggested.

The absorption coefficient is calculated, the frequency dependence of which is given by the factor $(\hbar\omega - \varepsilon_g)^{3/2}$ (ω is the light frequency, ε_g is the forbidden band gap), and the comparison with the absorption coefficient for the phonon mechanism is made.

ԼՈՒՅՍԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԴԻՍԼՈԿԱՅԻԱՆԵՐ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ
ԿԻՍԱՀԱԳՈՐԴՉՈՒՄ ՈՉ ՈՒԴԻՂ ՄԻՋԳՈՏԻԱԿԱՆ
ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ԴԵՊՋՈՒՄ

Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ, Մ. Ղ. ԳՈՒՄԱՇՅԱՆ, Կ. Ա. ՄԽՈՅԱՆ, Հ. Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Առաջարկված է լույսի կլանման նոր մեխանիզմ, պայմանավորված ոչ ուղիղ միջգոտիական անցումների դեպքում գծային դիսլոկացիաների հետ լիցքակիրների փոխազդեցությամբ: Հաշվված է կլանման գործակիցը, որի հաճախային կախումը արվում է $(\hbar\omega - \varepsilon_g)^{3/2}$ արտադրիչով (ω -ն լույսի հաճախությունն է, ε_g -ն՝ կիսահաղորդչի արգելված գոտու լայնությունը) և կատարված է համեմատության ֆունկցիոն մեխանիզմի դեպքում կլանման գործակցի հետ: