Известия НАН Армении, Физика, т. 31, № 2, с. 62—67 (1996)

УДК 537.33

ОСОБЕННОСТИ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНКАХ

С. Л. АРУТЮНЯН, В. А. АРУТЮНЯН, А. А. ДЖИВАНЯН, Г. О. ДЕМИРЧЯН

Гюмрийский филиал Армянского государственного инженерного университета

(Поступила в редакцию 2 сентября 1994 г.)

Исследовано влияние квантового размерного эффекта на формирование края фундаментального поглощения рентгеновских лучей. Доказано, что в данном случае стандартное дипольное приближение неприемлемо и методом теории возмущений изучены переходы электронов из основного состяния атома кристаллической решетки в зону проводимости (учитывая в конечных состояниях специфичное для пленок двумерное кулоновское притяжение между электроном и ионизированным атомом). Показано, что сечение фотоионизации сформировано из серий порогов, причем частотная зависимость резко отличается от соответствующей зависимости в массивных образцах.

Изучение края фундаментального поглощения рентгеновского излучения в массивных полупроводниковых образцах дает достаточно подробную информацию об одночастотных и многочастотных возбуждениях (см., например, [1, 2]).

Как известно [3, 4], при наличии квантового размерного эффекта (КРЭ) существенно перестраивается спектр электронов проводимости, а электронные состояния глубоких атомных уровней практически не изменяются.

В данной работе исследованы особенности края фундаментального поглощения рентгеновских лучей в тонких полупроводниковых пленках с учетом указанной специфики электронных состояний.

Поставленная таким образом задача решена на основе следующих соображений.

1) Независимо от конкретного вида конечных состояний наиболее эффективными будут перебросы электронов из начальных s-состояний [4,5]. Поэтому в качестве волновой функции начального состония используются орбитали Слэтера-Зинера [6]:

$$|i\rangle=\sqrt{\frac{2(Z-\sigma_{ne})}{\Gamma(2n+1)na_0}}\exp\left[-\frac{(Z-\sigma_{ne})}{na_0}r\right], \tag{1}$$

где $\Gamma(x)$—гамма функция Эйлера, $a_0=\dfrac{\hbar^2}{m_0e^2}$ боровский радиус, Z— порядковый номер атома, а значения параметров σ_{nl} табулированы (например, для основного состояния $n=1$, а значения σ_{10} для элементов Ga и As соответственно равны 3,36 и 4,4).

2) Электрон, переброшенный из состояний (1) в зону проводи-

мости (при пренебрежении подвижностью дырки) испытывает такое же кулоновское притяжение со стороны однократно ионизированного атома, как и «лишний» электрон мелких примесей, и отличается от последних только по происхождению. Следовательно, классическая теория Латинджера-Кона будет адекватно описывать также и состояние этих электронов—как в области дискретных, так и непрерывных энергий. В частности, справедливо условие $a \gg L$ (где a—эффективный боровский радиус электронов мелких примесей, L—толщина пленки), при выполнении которого, как известно, взаимодействие электрона с ядром становится двумерно-кулоновским с потенциальной энергией $V(\rho) = -\frac{e^2}{\varkappa\rho}$ [7] ($\varkappa = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}$, ε_1 и ε_2 диэлектрические проницаемости подложки и окружающей среды, ρ—расстояние в плоскости пленки).

Стандартным образом определяя волновые функции непрерывного спектра квантовыми числами ($|\mathbf{k}, m|$) и пользуясь методикой двумерного рассеяния [8], можно получить следующую нормированную волновую функцию, которая определяется квантовыми числами k_x и k_y:

$$|f\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} D_m(k) F\left(m + \frac{1}{2} + \frac{i}{ka},\ 2m+1,\ 2ik\rho\right) \times$$

$$\times \exp(-ik\rho)(2ik\rho)^m U_s(z) \cos m\gamma, \qquad (2)$$

где обозначено:

$$D_m(k) = (2 - \delta_{m0}) C_{km} \exp\left(-i \arg \Gamma\left(m + \frac{1}{2} - \frac{i}{ka}\right)\right),$$

$$C_{km} = \frac{\exp\left(\frac{\pi}{2ka}\right)}{(2m)! \sqrt{\operatorname{ch}\frac{\pi}{ka}}} \prod_{s=0}^{m-1} \sqrt{\left(s + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{k^2 a^2}},$$

$F(\alpha, \beta, x)$—вырожденная гипергеометрическая функция, γ—угол между векторами ρ и $\mathbf{k}$, $a = \frac{\varkappa\hbar^2}{m^* e^2}$ (m^*—эффективная масса), δ_{m0}—символ Кронекера, а

$$U_s(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\frac{\pi s}{L} z & s = 1,\ 3,\ 5 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi s}{L} z & s = 2,\ 4,\ 6 \end{cases} \qquad (3)$$

выражает зависимость волновой функции электрона проводимости от переменной z размерного квантования в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы.

3) Из закона сохранения энергии следует, что для минимальной (пороговой) частоты фотона выполняется соотношение

$$\hbar\omega_{min}=z^2_{эфф}I_0+\Delta+s^2\varepsilon_1+\varepsilon_{gap},$$

где I_0—энергия ионизации водорода, $Z_{эфф}$—эффективный „порядковый номер перехода" (для GaAs $Z_{эфф}\sim 28{,}53$ и 29, 56, см., например, [9]), $\Delta\sim\dfrac{\hbar^2}{m^*b^2}$ (b—постоянная решетки)—полуширина валентной зоны, ε_{gap}—ширина запрещенной зоны, $\varepsilon_1=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}$ —энергия основного состояния электрона в бесконечно-глубокой потенциальной яме.

Для конкретного случая $GaAs$ (при $L\sim 100$ Å) нетрудно показать, что минимальное волновое число $q_{min}=\dfrac{\omega_{min}}{c}$ (для любого значения s) удовлетворяет соотношению

$$\frac{q_{min}L}{S}\gg 1, \tag{4}$$

т. е. обычно используемое в подобных задачах дипольное приближение [10] в данном случае становится неприемлемым.

Предположим, что рентгеновское излучение распространяется перпендикулярно плоскости пленки (ось z) и представим его векторным потенциалом плоскополяризованной (σ-поляризация) электромагнитной волны

$$\mathbf{A}=\mathbf{A}_0\exp i(\omega t-qz).$$

Тогда, используя обычный вид оператора возмущения, с учетом (1), (2) и (4) для матричного элемента $i\to f$ перехода получаем

$$\langle f|v|i\rangle=\frac{2i}{k^3}\sqrt{\frac{\pi}{L}}\left[\frac{2(Z-\sigma)}{a_0}\right]^{5/2}\frac{e\hbar A_0}{m_0c}\cos\varphi' D_1^{\nu}(k)I, \tag{5}$$

где φ'—угол между векторами $\mathbf{A}_0$ и $\mathbf{k}$, а

$$I=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\exp(-2\nu\,\mathrm{arcctg}\,\nu_1\mathrm{ch}x)}{(\nu_1\mathrm{ch}^2x+1)^{5/2}}\left[\frac{3}{2}\nu_1\mathrm{ch}x+\nu\right]dx,$$

$$\nu=\frac{1}{ka},\qquad \nu_1=\sqrt{\nu^2+\frac{q^2}{k^2}}.$$

Так как подынтегральное выражение имеет резкий максимум при $x=0$, то интеграл легко вычисляется модифицированным методом Лапласа [11], что приводит к результату

$$I=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\frac{3}{2}+\frac{\nu}{\nu_1}\right)\frac{\exp(-2\nu\,\mathrm{arcctg}\,\nu_1)}{(\nu_1^2+1)^2}. \tag{6}$$

Подставляя (6) в (5) и учитывая особенности плотности состояний электронов в пленках в условиях КРЭ [3], для полного сечения фотоионизации в нерелятивистском приближении ($\hbar\omega\ll m_0c^2$) получаем:

$$\sigma_s=5\cdot 2^5\pi^2\alpha_0\left(\frac{m_0\varkappa}{m}\right)^6\frac{(Z-\sigma)^5 I_0}{\hbar\omega}\frac{a_0^3}{L}\sum_{s=1}^{<n>}F(\nu_s)\theta(\omega-\omega_s), \quad (7)$$

где $\alpha_0=\dfrac{e^2}{\hbar c}$ —постоянная тонкой структуры, $<n>$—символ целого значения числа $(\hbar\omega-z^2_{эфф}I_0-\Delta-\varepsilon_{gap})^{1/2}/\varepsilon_1^{1/2}$, $\theta(x)$—единичная ступенчатая функция, S—четное число,

$$F(\nu_s)=\frac{4+\frac{1}{\nu_s^2}}{\left(1+\frac{1}{\nu_s^2}\right)^4}\frac{e^{-4\nu_s\operatorname{arcctg}\nu_s}}{1-e^{-2\pi\nu_s}}, \qquad \nu_s=\sqrt{\frac{\frac{m}{m_0\varkappa}I_0}{\hbar\omega-\hbar\omega_s}},$$

$$\hbar\omega_s=Z^2_{эфф}I_0+\Delta+\varepsilon_1 s^2+\varepsilon_{gap}. \quad (8)$$

Из полученного выражения сечения фотоионизации (7) можно сделать следующие заключения.

1. Из-за особенностей плотности электронных состояний в пленках сечение фотоионизации сформировано из серий порогов, а пороговая частота определяется условием (8).

2. Поскольку для параметров рассмотренного конкретного образца выполняется соотношение $Z^2_{эфф}I_0\gg\Delta$, ε_1, ε_{gap}, то пренебрегая величинами $\Delta/Z^2_{эфф}I_0$, $\varepsilon_1/Z^2_{эфф}I_0$, $\varepsilon_{gap}/Z^2_{эфф}I_0$, в s-ом пороге поглощения ($\nu_s\to\infty$) из (7) получаем

$$\sigma_s=\frac{5\cdot 2^7\pi^2}{e^4}\alpha_0\left(\frac{m_0\varkappa}{m}\right)^6\frac{a_0^3}{L}\frac{(Z-\sigma)^5}{Z^2_{эфф}}s\cong 0{,}56\left(\frac{m_0\varkappa}{m}\right)^6\frac{a_0^3}{L}\frac{(Z-\sigma)^5}{Z^2_{эфф}}\cdot s, \quad (9)$$

где e—число Эйлера.

Как видно из формулы (9), сечение ионизации в тонких пленках аномально велико из-за фактора $\left(\dfrac{m_0\varkappa}{m}\right)^6$, уменьшается с увеличением толщины пленки и пропорционально номеру порога s. В отличие от сечения фотоионизации водородоподобного атома (где $\sigma\sim Z^{-2}$), в данном случае с увеличением Z оно увеличивается примерно по закону Z^3, что связано с изменением размерности взаимодействия в ходе фотоионизации электронов.

Между тем, учет первого порядка малости упомянутых величин приводит к нарушению линейной зависимости от s, и вклад от предыдущих порогов с увеличением s уменьшается.

3. Вблизи коротковолновой границы s-ого порога, когда

$$\hbar\omega\gtrsim Z^2_{эфф}I_0+\Delta+\varepsilon_1 s^2+\varepsilon_{gap},$$

зависимость σ от ω дается выражением

$$\sigma_s(\omega)=\sigma_s\left(1-\frac{29}{12}\frac{\hbar\omega-\hbar\omega_s}{\frac{m}{m_0\varkappa}I_0}\right).$$

Следовательно, после очередного скачка, вблизи s-ого порога (независимо от s) темп спада σ от ω в тонких пленках имеет линейный характер.

4. Численные оценки показывают, что длинноволновая граница фотоионизации атомов Ga и As равна 5,4 Å и 5,2 Å соответственно. Так что сечение фотоионизации пленки при $\lambda < 5{,}2$ A формируется наложением сечений фотоионизации атомов Ga и As, особенности которых приведены в пунктах 1—3.

В заключение отметим, что учет подвижности дырки (что является предметом отдельной задачи) может привести к смещению пороговых частот в сторону длинных волн, а также изменению частотной зависимости сечения фотоионизации в запороговых областях.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Р. Нокс.** Теория экситонов, М., Мир, 1966.
2. **М. А. Блохин.** Физика рентгеновских лучей. М., ГИТТЛ. 1957.
3. **Б. А. Тавгер, В. Я. Демиховский.** УФН, **96**, 61 (1968).
4. **М. Я. Амусья.** Атомный фотоэффект. М., Наука, 1987.
5. **Г. Бете, Э. Солпитер.** Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, М., 1960.
6. **М. Г. Веселов, Л. Н. Лобзовский.** Теория атома. М., Наука, 1986.
7. **Л. В. Келдыш.** Письма в ЖЭТФ, **29**, 716 (1979).
8. **В. В. Бабиков.** Метод фазовых функций в квантовой механике. М., Наука, 1976.
9. **И. Б. Боровский.** Физические основы рентгеноспектральных исследований. М., изд-во МГУ, 1956.
10. **В. Б. Берестецкий Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский.** Квантовая электродинамика. М., Наука, 1980.
11. **М. В. Федорюк.** Асимптотика, интегралы и ряды. М., Наука, 1987.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ՀԻՄՆԱՐԱՐ ԿԼԱՆՄԱՆ ԵԶՐԻ ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ ՉԱՓԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՑՎԱԾ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐՈՒՄ

Ս. Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ. Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ. Ա. ՋԻՎԱՆՅԱՆ, Գ. Հ. ԴԵՄԻՐՃՅԱՆ

Հետազոտված է չափային քվանտային էֆեկտի ազդեցությունը ռենտգենյան ճառագայթների հիմնարար կլանման եզրի ձևավորման վրա։ Ապացուցված է, որ տվյալ դեպքում ստանդարտ դիպոլային մոտավորությունը անընդունելի է, և խոտորումների տեսության օգնությամբ հետազոտված են բյուրեղական ցանցի ատոմի հիմնական վիճակից դեպի հաղորդական գոտի էլեկտրոնային անցումները (վերջնական վիճակում հաշվի առնելով թաղանթների համար բնորոշ երկչափ կուլոնյան ձգողությունը էլեկտրոնի և իոնացված ատոմի միջև)։

Ցույց է տրված, որ ֆոտոիոնիզացիայի կտրվածքը բաղկացած է շեմերի շարքից, ընդ որում հաճախային կախումը կտրուկ տարբերվում է մասսիվ նմուշներում համապատասխան կախումից։

PECULIARITIES OF THE X-RAY'S FUNDAMENTAL ABSORPTION EDGE IN SIZE-QUANTIZED SEMICONDUCTOR FILMS

S. L. HAROUTUNIAN, V. A. HAROUTUNIAN, H. A. JIVANIAN. G. H. DEMIRJIAN

An influence of the quantum size effect on the forming of X-ray's fundamental absorption edge is investigated. It is proved that in this case the standard dipole approximation is unacceptable and the electron transitions from the ground state of an atom in crystalline lattice to the conductivity band are investigated by means of the perturbation theory (the Coulomb attraction between the electron and ionized atom in final states is taken into account). It is shown that the photoionization cross-section is constituted by a series of thresholds, and the frequency dependence is essentially different from that in massive specimens.