

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННОЙ
ПРОВОЛОКЕ ПРИ НЕПРЯМЫХ МЕЖЗОННЫХ ПЕРЕХОДАХ:
РАССЕЯНИЕ НА ЗАРЯЖЕННЫХ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРАХ

М. М. АГАСЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 октября 1997г.)

Получено выражение для коэффициента поглощения размерно-квантованной полупроводниковой проволоки круглого сечения при рассеянии носителей заряда на заряженных примесных центрах. Исследовано также влияние различия диэлектрических постоянных проволоки и окружающей среды на коэффициент поглощения и показано, что для рассматриваемого механизма им можно пренебречь.

Как известно, в непрямозонных массивных полупроводниках ширина запрещенной зоны меньше порога прямых переходов, поэтому основной вклад в собственное поглощение обусловлен непрямыми межзонными переходами [1]. Имеющее место в низкоразмерных структурах размерное квантование приводит к зависимости вероятности непрямых межзонных переходов от характерных размеров образца, а также «включает» новые механизмы непрямых переходов, не имеющих место в массивных образцах [2, 3].

Преобладающим механизмом непрямых переходов как в массивных, так и низкоразмерных полупроводниковых структурах является рассеяние носителей заряда (НЗ) на фононах [1, 4, 5]. Однако при понижении температуры роль фононного рассеяния уменьшается, и определяющими становятся другие механизмы непрямых переходов, обусловленных, например, рассеянием НЗ на поверхностных шероховатостях образца [3], на дислокациях [6, 7].

В квазиодномерных структурах—квантованных проволоках при низких температурах возрастает роль примесного рассеяния и, тем самым, непрямого примесного поглощения, так как из-за сильной локализации НЗ в поперечной плоскости увеличивается вероятность рассеяния на примесных центрах.

В данной работе в рамках модели двух невырожденных параболических зон рассмотрено поглощение света в размерно квантованной полупроводниковой проволоке круглого сечения, обусловленное непрямими межзонными переходами НЗ при рассеянии на заряженных примесных центрах.

При непрямых межзонных переходах коэффициент поглощения дается известным выражением [8]

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi\chi_1^{1/2}}{ch} \sum_{i,m,f} \frac{|M_{ph}|^2 |M_{imp}|^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega), \quad (1)$$

где χ_1 — диэлектрическая постоянная проволоки, $\epsilon_i, \epsilon_m, \epsilon_f$ — энергии начального, промежуточного и конечного состояний соответственно, M_{ph} — оптический матричный элемент, M_{imp} — матричный элемент взаимодействия НЗ с примесным центром, ω — угловая частота световой волны.

В рамках модели бесконечно глубокой потенциальной ямы уровни энергии и волновые функции НЗ в проволоке хорошо известны [9]:

$$\epsilon_i \equiv \epsilon_{mn}^i = \epsilon_{mn}^f + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_l}, \quad \epsilon_{mn}^f = \frac{\hbar^2 j_{|m|n}^2}{2m_{l,\perp} R^2}, \quad (2)$$

$$\Psi_{mn}^i(\rho, \varphi, z) = \frac{J_{|m|}(j_{|m|n}/R)}{(\pi R^2 L)^{1/2} J_{|m|+1}(j_{|m|n})} \exp(im\varphi + ikz) U_{lk}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где R — радиус, а L — длина проволоки, $m_{l,\perp} (m_l)$ — поперечная (продольная) эффективная масса в l -ой зоне, k — волновое число, характеризующее движение НЗ вдоль оси проволоки (ось z), $j_{|m|n}$ — n -й корень функции Бесселя $J_m(x)$ первого рода порядка m , $U_{lk}(\mathbf{r})$ — бловская амплитуда в l -ой зоне. Квантовые числа m и n принимают значения $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $n=1, 2, 3, \dots$.

Перейдем к расчету коэффициента поглощения для переходов $v \rightarrow c \rightarrow c'$. Согласно [10], при значениях $R \leq 10^{-6}$ см, $\chi_1 \sim 10$, $\epsilon_g(0) \approx 1$ эВ ($\epsilon_g(0)$ — ширина запрещенной зоны в центре зоны Бриллюэна), когда параметр $qR \leq 0,2$ (q — волновой вектор световой волны), оптический матричный элемент дается выражением

$$|M_{ph}|^2 \approx \frac{8e^2 \hbar^2 |P_{cv}(k)|^2 \cos^2 \beta}{\gamma_1 m_0^2 L R \omega} \delta_{mm'} \delta_{nn'}, \quad (4)$$

где $P_{cv}(k)$ — матричный элемент импульса, β — угол между вектором поляризации световой волны и осью z , m_0 — масса свободного электрона. Как следует из (4), «вертикальные» межзонные переходы $v \rightarrow c$ удовлетворяют правилам отбора $m=m', n=n'$ (в $|M_{ph}|^2$ не учтены пропорциональные $(qR)^2$ члены, соответствующие переходам $m \rightarrow m' = m \pm 1$).

Для расчета матричного элемента M_{imp} , соответствующего переходу электрона из промежуточного состояния (m', n', k) в конечное состояние (m'', n'', k'') в области непрямого минимума (переходы $c \rightarrow c'$), рассмотрим рассеяние электрона на незранированном кулоновском центре, расположенном на оси проволоки в точке z_i . Если проволока находится в среде с диэлектрической постоянной χ_2 , то энергия взаимодействия находящегося в точке (ρ, z) электрона с примесным центром с зарядом e' , согласно [11], дается выражением

$$V_i(\rho, z) = -\frac{2ee'}{\chi_1 \pi} \int_0^\infty \cos t(z-z_i) [K_0(t\rho) + B_1(tR)I_0(t\rho)] dt, \quad (5)$$

где

$$B_1(x) = \frac{(\gamma-1)K_0(x)K_1(x)}{\gamma K_0(x)I_1(x) + I_0(x)K_1(x)}, \quad \gamma = \frac{\chi_1}{\chi_2}, \quad (6)$$

а $K_n(x), I_n(x)$ — модифицированные функции Бесселя соответственно первого и второго рода порядка $n=0,1$. С помощью выражений (3) и (5) для квадрата матричного элемента M_{imp} , усредненного по всем рассеивающим центрам, получим

$$\langle |M_{imp}|^2 \rangle = \frac{(4ee')^2}{\gamma_1^2 L^2} \delta_{m'm''} N [P_{m'n'}^{m''n''}(a) + B_1(a) Q_{m'n'}^{m''n''}(a)]^2, \quad (7)$$

где N — число рассеивающих примесных центров, $a = |k - k''|R$,

$$P_{m'n'}^{m''n''}(a) = \int_0^1 \frac{J_{|m'|}(\gamma_1 |m'| a x) J_{|m''|}(\gamma_1 |m''| a x)}{J_{|m'|+1}(\gamma_1 |m'| a) J_{|m''|+1}(\gamma_1 |m''| a)} K_0(ax) x dx, \quad (8)$$

а $Q_{m'n'}^{m''n''}(a)$ дается формулой (8) с заменой под интегралом функции $K_0(ax)$ на $I_0(ax)$.

Второе слагаемое в (7) учитывает различие диэлектрических постоянных проволоки и среды. При $\gamma_1 = \gamma_2$, согласно (6), $\gamma = 1$ и $B_1(a) = 0$. В области края поглощения можно приближенно считать, что $|k - k''| \approx k_0$, (k_0 определяет положение минимума зоны проводимости c'). Нетрудно убедиться в том, что параметр $k_0 R$ ограничен снизу. Действительно, при межзонных прямых $v \rightarrow c$ переходах, как правило, пренебрегают волновым вектором световой волны по сравнению со средним (характерным) волновым вектором электрона. Естественно поэтому считать, что $q \ll k_0$, или, с учетом приведенной выше оценки $qR \leq 0,2$, что $k_0 R \geq 2$ при $R \approx 10^{-6}$ см. В условиях, когда параметр $k_0 R$ порядка нескольких единиц и больше, в (6) можно воспользоваться асимптотическими выражениями для $K_n(k_0 R)$ и $I_n(k_0 R)$, в результате чего для B_1 получим:

$$B_1(k_0 R) \approx \pi \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \exp(-2k_0 R). \quad (9)$$

С учетом (9), а также по оценкам функций $P_{m'n'}^{m''n''}(k_0 R)$ и $Q_{m'n'}^{m''n''}(k_0 R)$, для физически разумных значений $k_0 R$ вторым слагаемым в (7) можно пренебречь. Это, в свою очередь, означает, что для рассматриваемого механизма не прямых переходов различие диэлектрических постоянных проволоки и среды можно пренебречь.

После подстановки выражений (2)–(4) и (7) в (1) и некоторых вычислений, для коэффициента поглощения в случае «разрешенных» переходов ($|P_c(k)|^2 \approx |P_c(0)|^2$) получим:

$$\alpha(\omega, R) \approx \alpha_0 \sum_{m,n,n''} [P_{m'n'}^{m''n''}(k_0 R)]^2 \theta(b_{mn}^{m''n''}), \quad (10)$$

где

$$\alpha_0 = \frac{128e^4 e'^2 n_L |P_c(0)|^2 (m_c \cdot m_v)^{1/2}}{m_0^2 \gamma_1^{5/2} \hbar^2 c R^2 [\varepsilon_g(0) - \varepsilon_g]^2 \omega} \cos^2 \beta, \quad (11)$$

$$b_{mn}^{m''n''} = \hbar \omega - \varepsilon_g - \varepsilon_{mn}^{c'} - \varepsilon_{mn}^v, \quad (12)$$

$$\Delta_{m,n}^{m'n'} = \varepsilon_{m,n}^{m'} + \varepsilon_{m,n}^{n'} \quad (13)$$

В (10) и (11) введены обозначения, n_L — линейная плотность примесных центров, m_c — продольная эффективная масса в области основного минимума, $\varepsilon_g = \varepsilon_g(k_0)$ — ширина запрещенной зоны, $\Theta(x)$ — функция единичного скачка. Согласно (10), с увеличением частоты падающего излучения коэффициент поглощения увеличивается скачками, имеющими место при значениях

$$\hbar\omega_{mn}^{m'n'} = \varepsilon_g + \Delta_{mn}^{m'n'}, \quad (14)$$

при этом величина скачка пропорциональна $[P_{mn}^{m'n'}(k_0 R)]^2$.

В случае „запрещенных“ переходов ($P_{c,c}(0)=0$, $|P_{c,c'}(0)|^2 \neq 0$) для коэффициента поглощения получаем:

$$\alpha'(\omega, R) \approx \alpha'_0 \sum_{m,n,n'} [P_{mn}^{m'n'}(k_0 R)]^2 b_{mn}^{m'n'} \Theta(b_{mn}^{m'n'}), \quad (15)$$

где

$$\alpha'_0 = \frac{64e^4 e'^2 n_L |P_{c,c'}(0)|^2 (m_c)^{1/2} (m_v)^{3/2}}{m_0^2 \gamma_i^{5/2} \hbar^4 c R^2 [\varepsilon_g(0) - \varepsilon_g]^2 \omega} \cos^2 \beta. \quad (16)$$

С увеличением частоты ω коэффициент поглощения, согласно (15), меняется линейно, при этом наклон прямой меняется скачками при значениях $\hbar\omega$, даваемых выражением (14).

Следует заметить, что суммирование в выражениях (10) и (15) распространяется на значения квантовых чисел m, n и n' , удовлетворяющих условию $\Delta_{mn}^{m'n'} \ll \varepsilon_g$.

Из количественных оценок энергий квантовых состояний ε_{mn}^i согласно формуле (2) следует, что по мере увеличения $\hbar\omega$ межзонные переходы «включаются» в следующем порядке: $(0,1) \rightarrow (0,1)$, $(0,2) \rightarrow (0,1)$, $(1,1) \rightarrow (1,1)$, $(0,1) \rightarrow (0,2)$ и т.д. При этом среди указанных наибольшее значение имеет парциальный коэффициент поглощения для перехода $(0,2) \rightarrow (0,1)$, пропорциональный величине $[P_{02}^{01}(k_0 R)]^2$. Такое поведение парциального коэффициента поглощения обусловлено смещением ближайшего к оси проволоки максимума вероятности распределения электронов в сторону оси проволоки, что, в свою очередь, усиливает взаимодействие электронов с расположенными на оси проволоки примесными центрами.

Помимо рассмотренных выше переходов $v \rightarrow c \rightarrow c'$, в коэффициент поглощения вносят вклад также переходы $v \rightarrow v' \rightarrow c'$, т.е. через промежуточные состояния с $k \approx k_0$. Однако, поскольку, как правило, $\varepsilon_g(0) < \varepsilon_c(k_0) - \varepsilon_v(k_0)$, то, согласно (1), вкладом переходов $v \rightarrow v' \rightarrow c'$ можно пренебречь.

Сравним парциальные коэффициенты непрямого фононного и примесного поглощения для переходов $(0,1) \rightarrow (0,1)$. В случае рассеяния НЗ на акустических объемных фононах [12] оценки, проведенные для проволоки Ge с $R=100 \text{ \AA}$ и $n_L=10^4 \text{ см}^{-1}$ (в предположении, что параметры проволоки совпадают с параметрами массивного образца)

показывают, что примесный механизм непрямого поглощения начинает превалировать над фононным при температурах $T > T_0 \approx 37\text{K}$. С уменьшением радиуса проволоки T_0 смещается в сторону высоких температур: так, при $R=50\text{\AA}$ и $n_L=10^{18}\text{см}^{-3}$ для T_0 получаем значение 67K .

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Ридли. Квантовые процессы в полупроводниках. М., Мир, 1986.
2. А. А. Киракосян, Э. А. Саркисян. ФТП, 11, 1629 (1977).
3. А. А. Киракосян, Э. А. Саркисян. Изв. АН АрмССР, Физика, 13, 444 (1978).
4. Н. Н. Hassan, Н. N. Spector. Phys. Rev., B 33, 5456 (1986).
5. Э. М. Казарян, Г. Л. Маляян, Р. Л. Энфиаджян. Изв. АН АрмССР, Физика, 7, 361 (1972).
6. А. А. Киракосян, М. К. Кумашян, К. А. Мхоян, А. А. Саркисян. Изв. НАН Армении, Физика, 30, 208 (1995).
7. Е. М. Kazaryan, К. А. Mkhoyan, Н. А. Sarkisyan. Thin Solid Films, 302, 54 (1997).
8. А. И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
9. Б. А. Тавгер, М. Д. Блох, Е. Л. Фишман. ФММ, 33, 1137 (1972).
10. А. А. Киракосян, Э. М. Казарян. Уч. зап. ЕГУ, 3, 44 (1974).
11. Д. Д. Иваненко, А. А. Соколов. Классическая теория поля. М.-Л., ГИТТЛ, 1951.
12. А. А. Киракосян, А. Л. Вартамян. Тезисы докл. XII Совещания по теории полупроводников, часть II, стр. 25, Киев, 1985.

LIGHT ABSORPTION IN A SIZE-QUANTIZED WIRE IN INDIRECT INTERBAND TRANSITIONS: SCATTERING BY CHARGED IMPURITY CENTERS

M. M. AGHASYAN, A. A. KIRAKOSYAN

The expression for the absorption coefficient of a size-quantized semiconductor wire with a circular cross-section is obtained for the scattering of charge carriers on charged impurity centers. The effect of a difference of dielectric constants of the wire and surrounding medium on the absorption coefficient is also studied and it is shown that for considered mechanism the mentioned difference can be neglected.

ԼՈՒՅՄԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ՔՎԱՆՏԱՑՎԱԾ ԼԱՐՈՒՄ ՈՉ ՈՒՂԻՂ ՄԻՋԳՈՏԻԱԿԱՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ԴԵՊՓՈՒՄ. ՑՐՈՒՄ ԼԻՑՔԱՎՈՐՎԱԾ ԽԱՆՈՒՈՒՐԴԱՅԻՆ ԿԵՆՏՐՈՆՆԵՐԻ ՎՐԱ

Մ. Մ. ԱՂԱՍՅԱՆ, Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Ստացված է չափայնորեն քվանտացված, շրջանային հատույթով կիսահաղորդչային լարի կլանման գործակցի համար արտահայտություն, հրր լիցքակիրները ցրվում են խառնուրդային կենտրոնների վրա: Ուսումնասիրված է նաև լարի և միջավայրի ղեկկտրական հաստատունների տարրերության ազդեցությունը կլանման գործակցի վրա և ցույց է տրված, որ դիտարկված մեխանիզմի համար այն կարելի է հաշվի չառնել: