

МЕЖЗОННОЕ ПРИМЕСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРОВОЛОКАХ ТИПА $A^{III}B^V$

© А.П. Джотян, Э.М. Казарян, А.С. Чиркинян

Ереванский государственный университет,

375049 Ереван, Армения

(Получена 30 июня 1995 г. Принята к печати 4 октября 1995 г.)

Исследовано межзонное примесное поглощение света в тонких проволоках полупроводника типа $A^{III}B^V$ с кейновским законом дисперсии для носителей заряда. Показано, что в отличие от проволок со стандартным законом дисперсии здесь реализуется переход на основное состояние примеси. Учет непарabolичности закона дисперсии приводит также к существенному отдалению линии поглощения, обусловленной переходом на основное примесное состояние от остальных линий.

Характерные особенности примесного поглощения, определяющиеся в полупроводнике край фундаментального поглощения, теоретически изучены в [1] для массивного образца и в [2] для тонких рамерно-квантованных полупроводниковых пленок.

В связи с актуальностью пространственно ограниченных, в частности, 1D полупроводниковых систем представляет интерес исследование спектральных характеристик поглощения тонкой проволоки полупроводника типа $A^{III}B^V$, содержащей примесь.

Рассмотрим простейший вид поглощения, связанного с примесными уровнями, электронные переходы из валентной зоны на донорные уровни (аналогично рассматриваются переходы с акцепторных уровней в зону проводимости). При этом потенциал проволоки будем аппроксимировать бесконечной двумерной потенциальной ямой, а вдоль оси проволоки будем предполагать сохранение одномерной зонной структуры.

Тогда состояние электрона в тонкой проволоке полупроводника типа $A^{III}B^V$ с кейновским законом дисперсии для носителей заряда в валентной зоне (v) и в зоне проводимости (c) в двузонном приближении описывается волновой функцией [3]

$$\Psi_{v,i,m,k}^c = \frac{1}{\sqrt{SL}} \frac{J_{|m|}(\lambda_i^{|m|} \rho / \rho_0)}{J_{|m|+1}(\lambda_i^{|m|})} e^{ikz} e^{im\varphi} U_{v,k}^c(z), \quad (1)$$

где $U_{v,k}^c(z)$ — амплитуда блоховской функции электрона вдоль оси z , S — площадь поперечного сечения проволоки с круглым сечением с радиусом ρ_0 , L — длина проволоки, $\lambda_i^{|m|}$ — i -й корень m -й функции Бесселя $J_{|m|}(x)$, \mathbf{k} — волновой вектор электрона, направленный вдоль оси z .

Энергетический спектр носителей заряда определяется выражением

$$E_v(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \left[\mathcal{E}_g^2 + 4\hbar^2 s^2 k^2 + \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_i^{|m|})^2}{\rho_0^2} \right]^{1/2} - \frac{\mathcal{E}_g}{2}, \quad (2)$$

где \mathcal{E}_g — ширина запрещенной щели, s — параметр, характеризующий непарabolicность зон ($\mathcal{E}_g = 2m_n s^2$, m_n — масса электрона на дне зоны проводимости), имеющий размерность скорости.

Далее необходимо определить в тонкой проволоке энергетический спектр связанных состояний водородоподобной примеси. В предположении, что боровский радиус связанного примесного состояния в массивном образце a_0 ($a_0 = \frac{\hbar^2 \chi}{\mu Z e^2}$, Z — заряд донорного центра) больше радиуса проволоки ρ_0 , примесная задача сводится к решению уравнения Ванье с одномерным потенциалом взаимодействия между заряженными частицами. Обычно (см., например, [4]) этот потенциал определяется усреднением кулоновского по волновым функциям по перечного движения и имеет вид $\frac{e^2}{X(a+|z|)}$, где a — величина порядка радиуса проволоки ρ_0 , X — диэлектрическая проницаемость кристалла. Такое отличие потенциала взаимодействия от кулоновского на малых расстояниях между частицами устраняет трудности, связанные с известной неустойчивостью основного состояния одномерного атома водорода [5]. Альтернативный подход в устраниении δ -образного поведения волновой функции основного состояния состоит в рассмотрении релятивистской (Клейн–Гордоновской) задачи одномерного атома водорода, что и было сделано в работе [6]. Напомним, что рассматриваемые нами полупроводники типа $A^{III}B^V$ отличаются существенной непарabolicностью закона дисперсии носителей заряда; последний в двузонном приближении [7] полностью аналогичен релятивистскому. Именно поэтому использование второго «релятивистского», подхода в нашей задаче представляется более естественным.

При таком рассмотрении задачи полная волновая функция, описывающая основное ($n = 0$) состояние электрона (дырки), связанного с донорным (акцепторным) центром имеет вид

$$\Psi_0 = \left(\frac{2b}{\alpha a_0} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{S}} \frac{J_{|m|}(\lambda_i^{|m|} \rho / \rho_0)}{J_{|m|+1}(\lambda_i^{|m|})} e^{im\varphi} e^{-\frac{b_i^{|m|} z}{\alpha a_0}}, \quad (3)$$

где $b_i^{|m|} = \left[\mu^2 s^4 + \hbar^2 s^2 (\lambda_i^{|m|})^2 / \rho_0^2 \right]^{1/2} / \mu s^2$, μ — масса носителя заряда (в используемом нами двузонном приближении массы электрона и

дырки равны [7]), $\alpha = \frac{e^2}{\chi_{hs}}$ — величина, аналогичная постоянной тонкой структуры (для InSb $\alpha = 0.2$), $a_0 = \frac{\hbar^2 \chi}{\mu e^2}$.

Для возбужденных состояний ($n = 1, 2, 3, \dots$) имеем

$$\Psi_n = \left[\frac{2(b_i^{[m]})^3}{a_D^3 n^3 (n+1)^2 S} \right]^{1/2} z e^{-\frac{-b_i^{[m]} z}{na_0}} L_n^1 \left(\frac{2zb_i^{[m]}}{na_D} \right) e^{im\varphi} \frac{J_{|m|}(\lambda_i^{[m]} \rho / \rho_0)}{J_{|m|+1}(\lambda_i^{[m]})}, \quad (4)$$

где L_n^1 — полиномы Лагерра.

Для энергии связанных состояний водородоподобной примеси получаем выражение

$$E = \sqrt{\frac{\mu^2 s^4 + \hbar^2 s^2 (\lambda_i^{[m]})^2 / \rho_0^2}{1 + Z^2 \alpha^2 / (n+t)^2}}, \quad (5)$$

где $t = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} [1 - 4Z^2 \alpha^2]^{1/2}$.

Коэффициент поглощения света будем вычислять на основе стандартной техники [8]. Ограничимся рассмотрением лишь вертикальных междузонных переходов в тонкой полупроводниковой проволоке при $T = 0$. Отметим также, что из-за неопределенности волнового вектора электрона в плоскости, перпендикулярной оси проволоки, нельзя пренебречь поперечной компонентой q_\perp импульса фотона.

Рассмотрим вначале переходы из валентной зоны на донорный уровень с $n = 0$. Для коэффициента поглощения разрешенного прямого перехода с учетом (2), (3) и асимптотического разложения для энергии основного состояния при $Z\alpha < 1$ $E_0 \simeq \alpha \sqrt{\mu^2 s^4 + \frac{\hbar^2 s^2 (\lambda_i^{[m]})^2}{\rho_0^2}} - \mu s^2$ получаем

$$\alpha_p = D [L_{cv}(0)]^2 \sum_{m,m',i,i'} K_{m,i}^{m',i'}(q_\perp \rho_0) \cos^2 \beta \times \\ \times \frac{(\hbar\omega - a)}{\hbar s [(\hbar\omega - a)^2 - \Delta^2]^{1/2}} \left\{ \frac{(\hbar\omega - a)^2 - \Delta^2}{\hbar^2 s^2} + \frac{(b_i^{[m]})^2}{\alpha^2 a_0^2} \right\}, \quad (6)$$

где $D = \frac{4\pi^3 e^2 \hbar^2 N_D}{m^2 n c \omega S L}$, $a = \alpha \Delta$, $\Delta = \sqrt{\mu^2 s^4 + \frac{\hbar^2 s^2 (\lambda_i^{[m]})^2}{\rho_0^2}}$, N_D — плотность донорных центров;

$$L_{cv}(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \int U_{ck}^*(z) \frac{dU_{vk}(z)}{dz} dz,$$

$$K_{m,i}^{m',i'}(q_\perp \rho_0) = \left[2 \int_0^1 \frac{J_{|m'|}(\lambda_{i'}^{[m']}(x)) J_{|m|}(\lambda_i^{[m]}(x)) J_{|m'-m|}(q_\perp \rho_0 x)}{J_{|m|+1}(\lambda_i^{[m]}) J_{|m'|+1}(\lambda_{i'}^{[m']})} dx \right]^2,$$

β — угол между вектором поляризации световой волны и осью oz .

Край поглощения при этом определяется выражением $\hbar\omega = a + \Delta$, которое в случае малости энергии проволочных уровней по сравнению с шириной запрещенной зоны принимает вид

$$\hbar\omega = \mathcal{E}_g + \frac{\hbar^2 (\lambda_i^{[m]})^2}{2\mu\rho_0^2} + \mu s^2(\alpha - 1). \quad (7)$$

Для коэффициента поглощения при разрешенных переходах на возбужденные уровни, соответственно, получаем (при $m = m', i = i'$)

$$\alpha_{p,n} = \frac{D}{\hbar s} [L_{cv}(0)]^2 \cos^2 \beta \sum_{i,m} \frac{(\hbar\omega - a_n)}{\sqrt{(\hbar\omega - a_n)^2 - \Delta^2} \left[\frac{(\hbar\omega - a_n)^2 - \Delta^2}{\hbar^2 s^2} + \frac{(\lambda_i^{[m]})^2}{a_D^2 n^2} \right]^2}, \quad (8)$$

где $a_n = \left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2}\Delta\right)$.

Для запрещенных переходов на основное состояние имеем

$$\alpha_{f,0} = \frac{D[L'_{c,v}(0)]^2}{2\hbar^3 s^3} \cos^2 \beta \sum_{i,m} \frac{(\hbar\omega - a_n)}{\sqrt{(\hbar\omega - a_n)^2 - \Delta^2} \left[\frac{(\hbar\omega - a_n)^2 - \Delta^2}{\hbar^2 s^2} + \frac{(\lambda_i^{[m]})^2}{a_D^2 n^2} \right]^2}. \quad (9)$$

Обсуждение результатов

В тонких размерно-квантованных проволоках со стандартным законом дисперсии носителей заряда спектр одномерных связанных водородоподобных состояний примеси (доноров и акцепторов) имеет вид $E_n = -\frac{R}{n^2}$ ($n = 0, 1, \dots$), т.е. основное состояние примесного водородоподобного атома с $n = 0$ неустойчиво, поскольку соответствует бесконечной энергии связи («падение на центр»). В связи с этим в таком полупроводнике отсутствует переход на основное состояние примеси. При учете непарabolичности закона дисперсии носителей заряда в тонких полупроводниковых проволоках типа $A^{III}B^V$ трудности, связанные с δ -образным поведением функции, описывающей основное состояние водородоподобной примеси, исчезают. В отличие от проволок со стандартным законом дисперсии здесь реализуется переход на основное состояние.

Как известно, в области примесного поглощения (например, в случае поглощения из валентной зоны на донорный уровень E_D в области от $\hbar\omega = \mathcal{E}_g - E_D$ до $\hbar\omega = \mathcal{E}_g$) зависимость $\alpha(\omega)$ определяется оптической плотностью состояний, пропорциональной в случае массивного образца $(\hbar\omega - \mathcal{E}_g + E_D)^{1/2}$, и $\theta(\hbar\omega - \mathcal{E}'_g + E_D)$ в случае пленки (\mathcal{E}'_g — эффективная ширина запрещенной зоны в пленке). Как и следовало ожидать, в тонкой проволоке корневые особенности $\alpha(\omega)$ (см. (6)) в области примесного поглощения повторяют ход плотности состояний при кейновском законе дисперсии носителей заряда, пропорциональной $(\hbar\omega - \mathcal{E}''_g + E_D)^{-1/2}$, где \mathcal{E}''_g — эффективная ширина запрещенной зоны в проволоке.

При энергиях, достаточных для переходов из валентной зоны в зону проводимости, частотная зависимость коэффициента поглощения в массивном образце определяется множителем $(1 + \chi)^{-4}$, где $\chi = m_v m_c^{-1} \cdot (\hbar\omega - E_g + E_D) E_D^{-1}$, m_c — масса электрона в зоне проводимости. Подобное уменьшение $\alpha(\omega)$ при удалении от края поглощения объясняется своеобразным правилом отбора $k_c \sim a_D^{-1}$ для квазиволновых чисел при примесном поглощении света, возникновение которого легко связать с принципом неопределенностей. Область значений k_c , где существенно примесное поглощение, имеет для массивного образца характерную границу $k_{c0} = a_D^{-1}$.

В тонкой пленке, где спектр водородоподобных связанных состояний примеси имеет вид $E_n = -\frac{R}{(n+\frac{1}{2})^2}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), происходит уширение этой области импульсов; парциальный же коэффициент поглощения при $k > k_{c0}$ в пленке падает по закону $(1 + \chi)^{-3}$.

При дальнейшем понижении размерности образца, т.е. в тонкой проволоке, мы наблюдаем более резкое уширение области допустимых квазиволновых чисел. Дело в том, что в $1D$ водородоподобном атоме электрон в основном состоянии локализуется на расстоянии от ядра, меньшем боровского радиуса связанных состояний. Радиус локализации электрона в этом случае определяется величиной $\lambda_s = \alpha a_0 = \frac{\hbar}{\mu s}$, аналогичной комптоновской длине волны, и величина k_c в этом случае порядка $1/\alpha a_0$. При переходах на возбужденные уровни по-прежнему $k_c \sim \frac{1}{\alpha a_0}$. С ростом частоты поглощаемого света при переходах на возбужденные донорные (акцепторные) уровни спад примесного поглощения происходит по закону $(1 + \chi)^{-2}$. При переходе на основной примесный уровень зависимость коэффициента поглощения от частоты иная: $\alpha(\omega) \sim (1 + \chi)^{-1}$. Последнее обстоятельство связано со спецификой одномерной «релятивистской» кулоновской задачи.

Ярким проявлением непарараболичности закона дисперсии носителей заряда в проволоке является существенная удаленность линии поглощения, обусловленной переходом на основное примесное состояние от остальных линий.

Список литературы

- [1] Оптические свойства полупроводников $A^{III}B^V$, под ред. Р.Уиллардсона, А.Бира (М., 1970).
- [2] А.М. Казарян, Э.М. Казарян. ФТП, 11, 1383 (1977).
- [3] А.П. Джотян, Э.М. Казарян, Ю.В. Каракашян. Изв. НАН Армении. Физика, 28, 150 (1993).
- [4] С.Л. Арутюнян, Э.М. Казарян. Изв. АН АрмССР. Физика, 12, 16 (1977).
- [5] R. Loudon. Amer. J. Phys., 27, 649 (1959).
- [6] H.N. Spector, J. Lee. Amer. J. Phys., 53, 248 (1985).
- [7] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., 1, 249 (1957).
- [8] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников (М., 1978).

Редактор В.В. Чалдышев

Interband impurity light absorption in III-V semiconductor wires

A.P.Dzhotyan, E.M.Kazaryan, A.S.Chirkinyan

Erevan State University, 375049 Erevan, Armenia

The interband impurity light absorption in thin size-quantized III-V semiconductor wires is theoretically studied. It is shown that due to the non-parabolic dispersion law of charge carriers the transition to the impurity basis state is realized and the absorption line is essentially separated from the other lines.
