

ИК-поглощение свободными носителями заряда с участием оптических фононов в структурах с квантовыми ямами

© С.И. Берил, С.М. Соковнич, А.С. Старчук

Приднестровский государственный университет им. Т.Г. Шевченко,
3300 Тирасполь, Молдавия

E-mail: tdsu10@idknet.com

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 11 ноября 2004 г.)

Рассматривается поглощение света свободными носителями заряда с участием поверхностных и объемных оптических фононов. Используются статистика Больцмана и гамильтониан электрон-фононного взаимодействия Пекара-Фрелиха для полярного слоя в рамках модели прямоугольной квантовой ямы (КЯ). Обнаружены различия в поведении вкладов в вероятность поглощения света для поверхностных и объемных мод в зависимости от ширины КЯ. Показано, что из-за различия частот объемных и поверхностных оптических колебаний линия фотон-фононного резонанса имеет сложную структуру. Исследовано влияние соседних сред на показатель поглощения света.

1. Введение

Оптические переходы свободных носителей заряда в массивных полупроводниках с участием полярных оптических фононов изучались в работе [1]. В [2–18] теоретически и в [19–24] экспериментально эта проблема была рассмотрена для размерно-ограниченных полярных полупроводниковых структур. Фононный спектр предполагался таким же, как в массивном кристалле.

В работе [15] использовалась модель, в которой электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) описывалось гамильтонианом Пекара-Фрелиха для бесконечного полярного кристалла, и для электронов, находящихся на уровнях размерного квантования, предполагалось выполнение закона сохранения импульса (так называемое приближение сохранения импульса — ПСИ). Анализ результатов, полученных в работе [15], показывает, что в области малых толщин квантовой ямы (КЯ) принятые приближения приводят к физически некорректным результатам.

Авторы работы [16] выходят за рамки ПСИ, однако, как и в [15], фононный спектр предполагается объемно-добным.

В настоящей работе на основе точного гамильтониана ЭФВ, полученного в [25] и обобщенного на случай произвольных многослойных структур в [26,27], теоретически исследовано ИК-поглощение света свободными носителями заряда в полярных полупроводниковых КЯ с участием поверхностных и объемных продольных оптических фононов. Показано, что, как и в случае рамановского рассеяния [28–30], в оптическом спектре поглощения появляются дополнительные пики, обусловленные поверхностными фононами.

В разделе 2 приводится гамильтониан системы и отмечены качественные особенности задачи. В разделе 3 рассчитана вероятность поглощения света с использованием точного гамильтониана. В разделе 4 обсуждаются полученные результаты.

В данной работе нами приняты приближение эффективной массы и статистика Больцмана для электронов. Движение электронов вдоль оси z (направленной перпендикулярно границе раздела) считается размерно-квантованным, а закон дисперсии для движения электрона в плоскости КЯ предполагается параболическим.

2. Гамильтониан и волновые функции

Рассмотрим слой полярного кристалла, занимающий область пространства $0 \leq z \leq d$ (с высокочастотной и статической диэлектрическими проницаемостями $\epsilon_2, \epsilon_{20}$) и граничащий с полубесконечными неполярными средами, занимающими области $z < 0$ и $z > d$ (с диэлектрическими проницаемостями ϵ_1 и ϵ_3 соответственно). Гамильтониан невзаимодействующих электрона и фононов имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} + \frac{\hat{P}_{\perp}^2}{2m_{\perp}^*} + V(z) + \hat{H}_{\text{ph}}^{(V)} + \hat{H}_{\text{ph}}^{(S_{1,2})}, \quad (1)$$

где $\hat{P}_{\perp}, \hat{P}_{\parallel}, m_{\perp}^*, m_{\parallel}^*$ — компоненты импульса и эффективной массы электрона в плоскости XY и вдоль оси Z соответственно;

$$V(z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq z \leq d, \\ \infty, & z < 0, z > d \end{cases} \quad (2)$$

— потенциальные барьеры на границе КЯ;

$$\hat{H}_{\text{ph}}^{(V)} = \sum_{\mathbf{Q}} \hbar\omega_{\mathbf{Q}} \hat{a}_{\mathbf{Q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{Q}}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_{\text{ph}}^{(S_i)} = \sum_{\eta} \hbar\Omega_{S_i} \hat{b}_{S_i, \eta}^+ \hat{b}_{S_i, \eta} \quad (i = 1, 2) \quad (4)$$

— гамильтонианы объемных и поверхностных фононных мод соответственно; $\omega_0, \Omega_{S_1}, \Omega_{S_2}, \mathbf{Q}(q_x, q_y, q_z), \boldsymbol{\eta}(\eta_x, \eta_y)$ — частоты и волновые векторы рассматриваемых мод; $\hat{a}_{\mathbf{Q}}^+, \hat{a}_{\mathbf{Q}}, \hat{b}_{S_i, \eta}^+, \hat{b}_{S_i, \eta}$ ($i = 1, 2$) — операторы рождения и уничтожения этих мод.

Волновая функция электрона в КЯ имеет вид

$$\psi(\mathbf{p}, z) = \left(\frac{2}{V}\right)^{\frac{1}{2}} U(\mathbf{p}, z) \exp(i\mathbf{k}_{\perp}\boldsymbol{\rho}) \sin(k_z z), \quad (5)$$

где $V = L_x L_y d$ — объем слоя, \mathbf{k}_{\perp} , $k_z = \frac{l\pi}{d}$ ($l = 1, 2, 3, \dots$) — компоненты волнового вектора электрона вдоль плоскости XY и вдоль оси Z соответственно, $U(\mathbf{p}, z)$ — бловковский множитель, d — толщина слоя.

Энергетический спектр электрона в такой системе описывается выражением

$$E(\mathbf{K}) = E(\mathbf{k}_{\perp}) + E_l = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}^*} + l^2 E_0, \quad (6)$$

где $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / (2m_{\parallel}^* d^2)$ — энергия низшего уровня размерного квантования, $\mathbf{K} = \mathbf{k}_{\perp} + \mathbf{e}_z k_z$ — волновой вектор электрона.

Плотность состояний электрона с фиксированным спином равна

$$N[E_l(\mathbf{K})] = l m_{\perp}^* / (2\pi \hbar^2 d). \quad (7)$$

Электрон из зоны проводимости слоя взаимодействует с двумя поверхностными оптическими модами (S_1, S_2) и одной продольной конфайнмент-модой (V) [26,27].

Гамильтониан ЭФВ имеет вид

$$\hat{H}_{e-ph} = \hat{H}_{e-ph}^{(V)} + \hat{H}_{e-ph}^{(S_1, S_2)}. \quad (8)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-ph}^{(V)} = & \sum_{\substack{\eta > q_z \\ (q_z \neq 0)}} C_Q e^{i\mathbf{q}_{\perp}\boldsymbol{\rho}} \left[e^{i\mathbf{q}_{\perp}\boldsymbol{\rho}} + \frac{1}{1+C} \right. \\ & \left. \times \left(C - \frac{\text{ch}[q_{\perp}(z - \frac{d}{2})]}{\text{ch}(\frac{q_{\perp}d}{2})} \right) \right] (\hat{a}_{-\mathbf{Q}}^+ + \hat{a}_{\mathbf{Q}}) \quad (9) \end{aligned}$$

— гамильтониан взаимодействия электрона с объемными оптическими фононами;

$$\hat{H}_{e-ph}^{(S_1)} = \sum_{\eta} C_{\eta}^{(1)} \exp(i\eta\boldsymbol{\rho}) \frac{\text{ch}[\eta(z - \frac{d}{2})]}{\text{ch}(\frac{\eta d}{2})} (\hat{b}_{S_1, -\boldsymbol{\eta}}^+ + \hat{b}_{S_1, \boldsymbol{\eta}}), \quad (10)$$

$$\hat{H}_{e-ph}^{(S_2)} = \sum_{\eta} C_{\eta}^{(2)} \exp(i\eta\boldsymbol{\rho}) \frac{\text{sh}[\eta(z - \frac{d}{2})]}{\text{ch}(\frac{\eta d}{2})} (\hat{b}_{S_2, -\boldsymbol{\eta}}^+ + \hat{b}_{S_2, \boldsymbol{\eta}}), \quad (11)$$

$\hat{H}_{e-ph}^{(S_1, S_2)}$ — гамильтонианы взаимодействий электрона с поверхностными оптическими модами в полярном кристаллическом слое, граничащем с неполярными слоями.

В формулах (9)–(11) введены следующие обозначения:

$$|C_Q|^2 = \frac{1}{L_x L_y d} \frac{4\pi\alpha_V (\hbar\omega_0)^2}{Q^2 \beta_V}, \quad (12)$$

$$\alpha_V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{1}{\epsilon_V^*} \left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_0} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \beta_V = R_V^{-1} = \left(\frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (13)$$

$$(\epsilon_V^*)^{-1} = \epsilon_2^{-1} - \epsilon_{20}^{-1}, \quad m^* = \frac{1}{2}(m_{\parallel}^* + m_{\perp}^*), \quad (14)$$

$$Q^2 = q_{\perp}^2 + q_z^2, \quad (15)$$

$$C = \left[\left(\frac{2}{q_{\perp}d} \right) \text{th} \left(\frac{q_{\perp}d}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$|C_{\eta}^{(i)}|^2 = \frac{1}{L_x L_y} \frac{2\pi\alpha_{S_i} (\hbar\Omega_{S_i})^2}{\eta\beta_{S_i}}, \quad (16)$$

$$\alpha_{S_i} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \frac{1}{\epsilon_{S_i}^*} \left(\frac{m^*}{2\hbar\Omega_{S_i}} \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\beta_{S_i} = R_{S_i}^{-1} = \left(\frac{2m^* \Omega_{S_i}}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (17)$$

$$\frac{1}{\epsilon_{S_1}^*} = \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon \text{th}(\frac{\eta d}{2})} - \frac{1}{\epsilon_{20} + \epsilon \text{th}(\frac{\eta d}{2})}, \quad (18)$$

$$\frac{1}{\epsilon_{S_2}^*} = \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon \text{cth}(\frac{\eta d}{2})} - \frac{1}{\epsilon_{20} + \epsilon \text{cth}(\frac{\eta d}{2})}. \quad (19)$$

Часть конфайнмент- (ω_0) и поверхностных (Ω_{S_i} , $i = 1, 2$) фононов находятся в соотношении Лиддена-Сакса-Теллера

$$\omega_0^2 = \frac{\epsilon_{20}}{\epsilon_2} \omega_{\text{TO}}^2, \quad (20)$$

$$\Omega_{S_1}^2 = \left[\frac{\epsilon_{20} + \epsilon \text{th}(\frac{\eta d}{2})}{\epsilon_2 + \text{cth}(\frac{\eta d}{2})} \right] \omega_{\text{TO}}^2,$$

$$\Omega_{S_2}^2 = \left[\frac{\epsilon_{20} + \epsilon \text{th}(\frac{\eta d}{2})}{\epsilon_2 + \text{th}(\frac{\eta d}{2})} \right] \omega_{\text{TO}}^2. \quad (21)$$

Для упрощения математических расчетов мы положили $\epsilon_1 = \epsilon_3 \equiv \epsilon$ (симметричная структура).

Гамильтониан ЭФВ (8)–(11) был получен в работе [25] на основе процедуры, предложенной в [31], которая позволила корректно и последовательно выделить нормальные моды в трехслойной полярной структуре. Кроме очевидного разделения на конфайнмент- и поверхностные части (четную S_1 и нечетную S_2) эти гамильтонианы обладают рядом свойств, важных для дальнейшего анализа.

1) В отличие от гамильтониана неперенормированного объемного спектра они имеют правильную размерную зависимость, которая может быть легко физически интерпретирована.

2) Константы ЭФВ и частоты поверхностных мод (в отличие от объемных) содержат материальные параметры сред, граничащих со слоем, в котором локализованы электроны.

3) Как видно из выражений (20), (21), частоты поверхностных колебаний зависят от толщины, а также от параметра дисперсии; это может служить дополнительной характеристикой процессов ЭФВ с участием фононов упомянутого типа.

Гамильтониан взаимодействия электрона со светом имеет вид [32]

$$\hat{H}_{\text{el-L}}^{\text{abs}} = -\frac{e}{m^*} \left(\frac{\hbar N}{2V\pi\epsilon\omega_2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp(i\mathbf{q}_V\mathbf{r})(\mathbf{e}\mathbf{p}) \quad (22)$$

для поглощения света и

$$\hat{H}_{\text{el-L}}^{\text{em}} = -\frac{e}{m^*} \left(\frac{\hbar(N+1)}{2V\pi\epsilon\omega_2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp(-i\mathbf{q}_V\mathbf{r})(\mathbf{e}\mathbf{p}) \quad (23)$$

для излучения (включая спонтанное излучение).

Здесь N — число фотонов в слое объемом V ; ω — частота монохроматической световой волны; \mathbf{q}_V — волновой вектор световой волны; \mathbf{p} — оператор квазиимпульса электрона в плоскости XY ; \mathbf{e} — единичный вектор поляризации световой волны (в дальнейшем предполагается перпендикулярным оси z).

Тогда гамильтониан электрон-фонон-фотонного взаимодействия можно записать в виде

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_{\text{el-L}}^{\text{em}} + \hat{H}_{\text{el-L}}^{\text{abs}} + \hat{H}_{\text{e-ph}}. \quad (24)$$

3. Вероятность поглощения света

Предполагая, что как ЭФВ, так и взаимодействие, обусловленное светом, достаточно малы, и, кроме того, считая, что $\omega\tau \gg 1$ (где τ — среднее время жизни электрона), используем теорию возмущений (ТВ). Поскольку в первом порядке ТВ поглощения света электроном при указанной поляризации света не происходит, используем второй порядок ТВ. Во втором порядке ТВ вероятность перехода в единицу времени определяется выражением [33]

$$W_{\text{el}}(\mathbf{K}) = \frac{2\pi}{\hbar} \int \left| \sum_{\mathbf{k}'', l''} \frac{\langle \mathbf{k}', l' | \hat{H}_{\text{int}} | \mathbf{k}'', l'' \rangle \langle \mathbf{k}'', l'' | \hat{H}_{\text{int}} | \mathbf{k}, l \rangle}{E(\mathbf{K}') - E(\mathbf{K}) \mp \hbar\Omega} \right|^2 \times \delta(E(\mathbf{K}') - E(\mathbf{K}) \mp \hbar\Omega) dS', \quad (25)$$

где dS' — плотность конечных состояний в интервале $d\mathbf{K}'$ ($dS' = 2/(2\pi)^2 d\mathbf{K}'$), а интегрирование выполняется по всем конечным состояниям электрона; l, l' и l'' — номера подзон размерного квантования. Следует подчеркнуть, что переходы, обеспечивающие поглощение света, описываемое формулой (25), являются двухступенчатыми процессами с поглощением (эмиссией) единственного фотона (фонона) на каждом этапе, которые могут следовать друг за другом в любом порядке [32].

Рассмотрим возможные переходы в системе и обозначим через $W_{l,l'}$ разность вероятностей поглощения и испускания фотона в единицу времени. Тогда

$$W_{l,l'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}} W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}', l' \\ \mathbf{k}, l \end{matrix} \right), \quad (26)$$

где $W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}', l' \\ \mathbf{k}, l \end{matrix} \right)$ — разность вероятностей переходов с поглощением и излучением фотона; $\sum_{\mathbf{q}}$ означает суммирование по волновым векторам фононов произвольного типа (объемных, поверхностных).

Для электронов предполагаем применимой статистику Больцмана

$$f_{\mathbf{k},l} = \exp\left(\frac{\xi}{T}\right) \exp\left(-\frac{E(\mathbf{K})}{T}\right) \ll 1, \quad (27)$$

где ξ — химический потенциал, T — температура электронного газа, $f_{\mathbf{k},l}$ — функция распределения электронного газа.

Суммируя вероятности поглощения фононов в единицу времени для переходов между различными подзонами размерного квантования, имеем

$$W = \sum_{l,l'} W_{l,l'}, \quad (28)$$

где $W, W_{l,l'}$ могут быть обусловлены любой из рассматриваемых фононных мод (V, S_1, S_2); W — полная вероятность поглощения, полученная простым суммированием по рассматриваемым фононным модам, а $W_{l,l'}$ описывает вероятность поглощения при переходах между подзонами размерного квантования l, l' с участием фононов.

Для объемных (конфайнмент) фононов имеем

$$W_{l,l'}^{(V)} = -\frac{2T}{\epsilon\hbar^3 d^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\epsilon_p^*} \left(\frac{\omega}{\omega_0^3} \right) \frac{\text{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2T}\right)} \times \exp\left(\frac{2\mu - (E_l + E_{l'})}{2T}\right) \left[H_{l,l'}^{(V)}(\omega + \omega_0) + H_{l,l'}^{(V)}(\omega - \omega_0) \right], \quad (29)$$

где

$$H_{l,l'}^{(V)}(\Omega) = H_{l,l'}^{(V,0)}(\Omega) + H_{l,l'}^{(V,1)}(\Omega) + H_{l,l'}^{(V,2)}(\Omega). \quad (30)$$

Общий вид каждого из членов (29) может быть представлен следующим образом:

$$H_{l,l'}^{(V,i)}(\Omega) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{\pi E_0}{T} \right)^{\frac{1}{2}} \times \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} dt t^2 \exp\left(-\lambda t^2 - \frac{\mu(\Omega, l, l')}{t^2}\right) I^{(i)}(t), \quad i = 1, 2, \quad (31)$$

где

$$\lambda = \frac{E_0}{4\pi^2 T}, \quad \mu(\Omega, l, l') = \frac{\pi^2 |\hbar\Omega - (E_{l'} - E_l)|}{E_0 T}. \quad (32)$$

Выражения для $I^{(i)}(t)$ имеют вид

$$I^{(i,0)}(t) = \frac{1 + \delta_{l,l'}}{t^2 + \pi^2(l-l')^2} + \frac{1}{t^2 + \pi^2(l+l')^2}, \quad (33)$$

$$I^{(i,1)}(t) = \frac{-2(4\pi^2 l, l')^2 t [1 - (-1)^{l+l'} \exp(-t)]}{[t^2 + \pi^2(l-l')^2]^2 [t^2 + \pi^2(l+l')^2]^2}, \quad (34)$$

$$I^{(i,2)}(t) = \frac{1}{t} \left[\frac{\delta_{l,l'} C(t) - G(t)}{1 - C(t)} \right] + \frac{2}{1 - C(t)} (\delta_{l,l'} C(t) - G_1(t)) \left[\frac{1 - (-1)^{l-l'} \exp(-t)}{t^2 + \pi^2(l-l')^2} - \frac{1 + (-1)^{l+l'} \exp(-t)}{t^2 + \pi^2(l+l')^2} \right]. \quad (35)$$

Явный вид для $G_1(t)$ приведен далее.

Интегрирование в первом члене (30) дает

$$H_{l,l'}^{(v,0)}(\Omega) = \exp\left(-\frac{|\hbar\Omega - (E_l - E_{l'})|}{2T}\right) \left\{ 1 + \frac{\delta_{l,l'}}{2} - \frac{|l-l'|}{2} \times \sqrt{\frac{\pi E_0}{4}} \exp(v^2(\Omega, l, l')) \operatorname{erfc}(v(\Omega, l, -l')) + \frac{|l+l'|}{4} \sqrt{\frac{\pi E_0}{4}} \exp(v^2(\Omega, l, -l')) \operatorname{erfc}(v(\Omega, l, +l')) \right\}, \quad (36)$$

где

$$v^2(\Omega, l, l') = \frac{\hbar\Omega - (E_l - E_{l'})}{2|l+l'|\sqrt{E_0 T}} + \frac{|l+l'|\sqrt{E_0}}{2\sqrt{T}} \quad (37)$$

находится в соответствии с результатами, полученными в рамках ПСИ [15]. Выражение (31) при $l' = 1, 2$ не может быть проинтегрировано в аналитическом виде. Пренебрегая третьим членом в (30), получим результат работы [16]. С физической точки зрения это эквивалентно пренебрежению обращением в нуль потенциала ЭФВ на границах КЯ.

Выражение для вероятности поглощения света с участием поверхностных фононных мод аналогично (29):

$$W_{l,l'}^{(S_i)} = \frac{2T}{\varepsilon \hbar^3 d^2} \left(\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0} \right)^2 \times \exp\left(\frac{2\xi - (E_l + E_{l'})}{2T}\right) \left[H_{l,l',+}^{(S_i)} + H_{l,l',-}^{(S_i)} \right], \quad i = 1, 2, \quad (38)$$

где

$$H_{l,l',\pm}^{(S_i)} = \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{\frac{\pi E_0}{T}} \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} dt \frac{t^2}{\varepsilon_{S_i}^*(t)} \left(\frac{\omega}{\Omega_{S_i}^3(t)} \right) \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{\operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\Omega_{S_i}(t)}{2T}\right)} \times \exp\left(-\lambda t^2 - \frac{\mu(\omega - \Omega_{S_i}(t), l, l')}{t^2}\right) I^{(S_i)}(t), \quad (39)$$

$$I^{(S_i)}(t) = \frac{|G_{S_i}(t)|}{t \operatorname{th}\left(\frac{t}{2}\right)}, \quad (40)$$

$$G_{S_1}(t) = \operatorname{th}\left(\frac{t}{2}\right) \left[1 - (-1)^{l-l'} \times \left[\frac{1}{t^2 + \pi^2(l-l')^2} - \frac{1}{t^2 + \pi^2(l+l')^2} \right] \right], \quad (41)$$

$$G_{S_2}(t) = - \left[\frac{1 - (-1)^{l-l'}}{t^2 + \pi^2(l-l')^2} - \frac{1 + (-1)^{l+l'}}{t^2 + \pi^2(l+l')^2} \right]. \quad (42)$$

Коэффициент поглощения света K_0 можно получить, используя соотношение между вероятностью и коэффициентом поглощения [33]

$$K_0 = \frac{\sqrt{\varepsilon_2} W}{\varepsilon}. \quad (43)$$

4. Результаты и обсуждение

Для получения численных результатов использовались следующие значения параметров: 1) для структуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $m^* = 0.0667m_0$, $\hbar\omega_0 = 35.2 \text{ meV}$, $x = 0.30$, $\varepsilon_2 = 10.9$, $\varepsilon_{20} = 12.5$, $\varepsilon = 10.1$, $R_V = (\hbar/2m^*\omega_0)^{1/2} \approx 4.0 \text{ nm}$; 2) для структуры неполярный диэлектрик/ CdTe /неполярный диэлектрик $m^* = 0.092m_0$, $\hbar\omega_0 = 21.7 \text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 7.13$, $\varepsilon_{20} = 10.6$, $\varepsilon = 2.0$, $R_V = (\hbar/2m^*\omega_0)^{1/2} \approx 4.4 \text{ nm}$.

Кроме того, величины диэлектрических проницаемостей для соседних сред ε выбирались из интервала от 1 до 80: $\varepsilon = 1$ соответствует вакууму, а $\varepsilon = 80$ — случаю сильного экранирования ЭФВ соседними средами.

Проанализируем зависимости вероятности поглощения света от его частоты ω , ширины ямы d и диэлектрической проницаемости ε соседних сред, полученные в результате численных расчетов для двух различных моделей: модель 1 соответствует работе [15], а модель 2 — работе [16].

На рис. 1, *a, b* показаны зависимости вероятности поглощения света W от его частоты, деленной на частоту продольных объемных оптических фононов (ω/ω_0), для различных толщин d ямы, в которой локализован электрон. Из этих рисунков видно, что резкие пики наблюдаются, когда частота света совпадает с частотами объемных мод, а вклад поверхностных мод имеет максимум в диапазоне частот поверхностных колебаний. Модели 1 и 2 дают немного более узкие и резкие кривые поглощения ($W^{(1)}$ и $W^{(2)}$), чем полученные нами.

Для процессов второго порядка с поглощением фотона и последующим испусканием фотона недостающая энергия может быть получена от электрона. При высоких температурах, когда средняя энергия электронов значительно больше энергии фотона, практически все электроны способны участвовать в рассеянии света, и интенсивность рассеяния возрастает.

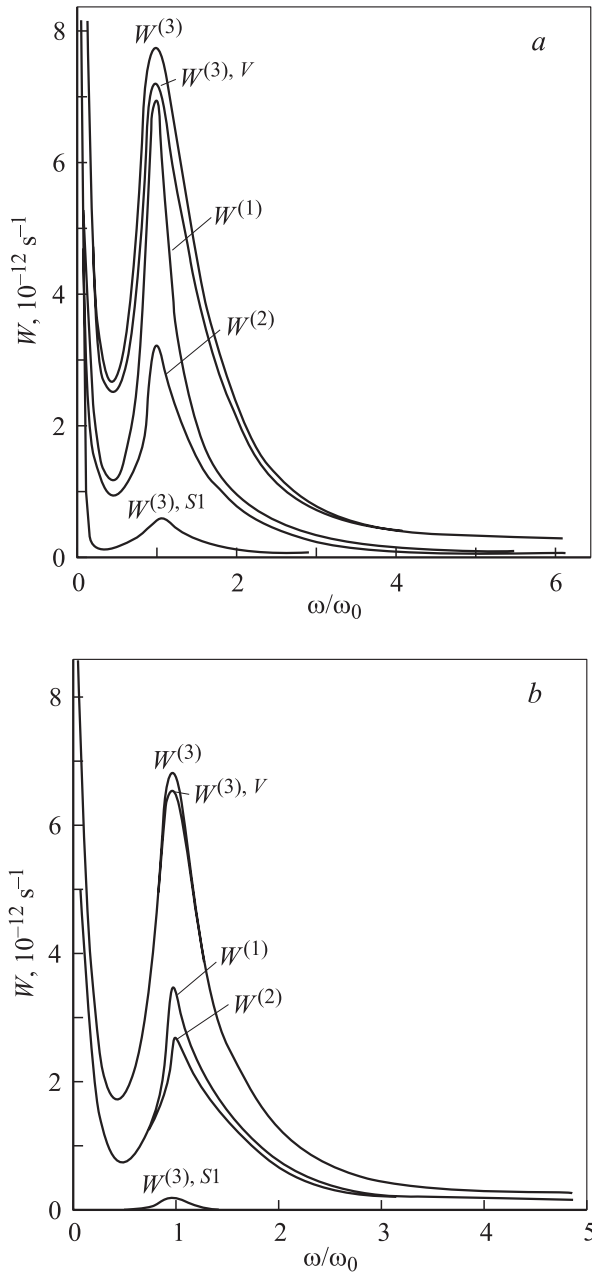


Рис. 1. Вероятность поглощения света в структурах GaAs/Al_xGa_{1-x}As как функция частоты света. $W^{(3),S1}$ — вклад от участия четной моды поверхностных фононов, $W^{(3),V}$ — вклад от участия конфайнмент-фононов, $W^{(1)}$ — результаты расчета по модели 1, $W^{(2)}$ — результаты расчета по модели 2, $W^{(3)} = W^{(3),V} + W^{(3),S1} + W^{(3),S2}$. $d = 3.0$ (a) и 30.0 nm (b). $T = 220.0$ K.

Заметим, что величины резонансной частоты, а также относительных смещений резонансных пиков поверхностных и объемных фононов согласуются с предсказываемыми формулами (29) и (38).

На рис. 2 приведены зависимости вероятности поглощения света от толщины ямы d , полученные в рамках моделей 1, 2, и данные настоящей работы.

Необходимо отметить совершенно различное поведение коэффициента поглощения света для разных моделей в пределе малых d . Так, для модели 1 в пределе малых d величина $W^{(1)}$ резко возрастает. Для модели 2 вероятность поглощения $W^{(2)}$, рассчитанная на основе гамильтониана ЭФВ Пекара-Фрелиха для массивного кристалла, обнаруживает стремление к конечному значению. В то же время полученная на основе точного гамильтониана величина $W^{(3)}$ правильно описывает поведение вероятности поглощения в пределе $d \rightarrow 0$. На рис. 2, a выделены два типа вкладов в вероятность поглощения, которые имеют место ввиду присутствия различных фоновых мод. Оба вклада стремятся к нулю при $d \rightarrow 0$, поэтому $W^{(3)} \rightarrow 0$ при $d \rightarrow 0$ ($W^{(3)} = W^{(3),V} + W^{(3),S1} + W^{(3),S2}$). Такое поведение $W^{(3)}$ обусловлено стремлением константы ЭФВ к нулю в пределе $d \rightarrow 0$ в результате исчезновения полярного материала. Следует подчеркнуть, что при малых d в структуре с сильным ЭФВ (CdTe) взаимодействие с

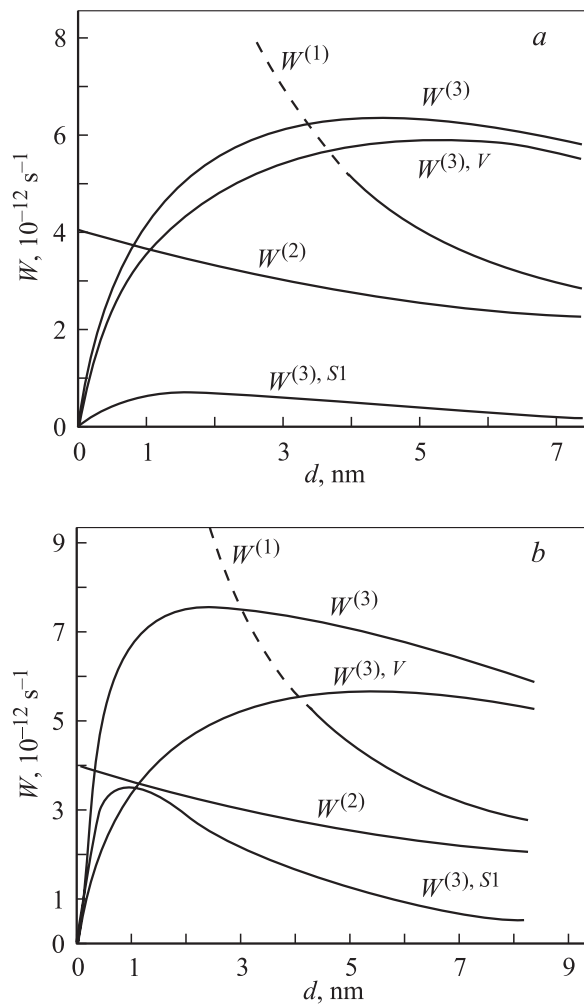


Рис. 2. Вероятность поглощения света в структуре с квантовыми ямами как функция толщины полярного слоя. Обозначение вкладов — то же, что и на рис. 1. $\omega = 1.2\omega_0$. a — GaAs/Al_xGa_{1-x}As, b — CdTe/неполярная среда ($\epsilon = 2$).

объемными фононами ослабевает быстрее, чем взаимодействие с поверхностными (рис. 2, *b*).

В области больших d ($d > (7-10)R_V$, где R_V — поляронный радиус в объемном кристалле) имеет место асимптотическое совпадение вероятностей поглощения с участием объемных полярных оптических фононов, обусловленное подобным асимптотическим поведением гамильтонианов. Кроме того, нужно отметить, что поглощение с участием поверхностных полярных оптических мод является преимущественно внутриподзонным процессом в отличие от процессов электронного рассеяния с участием объемных фононов, что обусловлено плавным изменением амплитуды ЭФВ для поверхностных фононов вдоль оси z .

5. Заключение

Таким образом, на основе сравнения результатов, полученных в рамках моделей 1 и 2, и данных расчета, проведенного в настоящей работе, можно сделать следующие выводы.

1) В области малых толщин ($d \lesssim (7-10)R_V$) вычисления вероятности поглощения света с использованием объемного гамильтониана Фрелиха приводят к физически некорректным результатам для вероятности поглощения и коэффициента поглощения света.

2) Для структуры с КЯ из сильнополярных полупроводниковых материалов при изменении толщины ямы должно ожидать перераспределение эффективности абсорбированных процессов между различными модами.

3) С позиций моделей 1 и 2 для структур с КЯ из неполярного материала, граничащими с соседними полярными слоями, фотон-фононный резонанс отсутствует. В то же время полученные в настоящей работе результаты указывают на возможность такого процесса вследствие существования поверхностных оптических фононов.

4) Подбирая вещества соседних слоев с большими значениями ϵ_1 и ϵ_3 , можно добиться существенного уменьшения коэффициента поглощения света в КЯ.

Заметим, что при численном сравнении полученных результатов с данными экспериментов по ИК-поглощению в тонких пленках модель с бесконечными барьерами на границах может быть хорошим приближением для структур типа CdTe/CdSe. Однако для структуры типа $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ необходимо принять во внимание конечную высоту барьера на границах КЯ.

Список литературы

- [1] G.Q. Hai, F.M. Peeters, J.T. Devreese. Phys. Rev. B **7**, 16, 10 358 (1973).
- [2] K. Hess. Appl. Phys. Lett. **35**, 7, 484 (1978).
- [3] P.J. Price. Phys. Rev. B **30**, 4, 2234 (1984).
- [4] B.K. Ridley. J. Phys. C.: Solid State Phys. **15**, 28, 5899 (1982).

- [5] F.A. Riddoch, B.K. Ridley. J. Phys. C.: Solid State Phys. **16**, 36, 6971 (1983).
- [6] B.K. Ridley. Phys. Rev. B **39**, 8, 5282 (1989).
- [7] M. Babiker, A. Ghosal, B.K. Ridley. Superlatt. Microstruct. **5**, 1, 133 (1989).
- [8] R. Haupt, L. Wender. Phys. Rev. B **44**, 4, 1850 (1991).
- [9] S. Rudin, T.L. Reinecke. Phys. Rev. B **41**, 11, 7713 (1990).
- [10] N.C. Constantinou, B.K. Ridley. J. Phys.: Cond. Matter **2**, 36, 7465 (1990).
- [11] H.N. Spector. Phys. Rev. B **28**, 2, 971 (1983).
- [12] H. Adamska, H.N. Spector. J. Appl. Phys. **56**, 4, 1123 (1984).
- [13] H.H. Hassan, H.N. Spector. Phys. Rev. B **33**, 8, 5456 (1986).
- [14] F. Comas, C. Trallero Giner, H. Leon. Phys. Stat. Sol. (b) **138**, 1, 219 (1986).
- [15] C. Trallero Giner, M. Anton. Phys. Stat. Sol. (b) **133**, 2, 563 (1986).
- [16] В.Л. Гуревич, Д.А. Паршин, К.Э. Штенгель. ФТТ **30**, 7, 1466 (1988).
- [17] C. Sunku, S. Mikhopudkyay. J. Phys.: Cond. Matter **9**, 44, 9597 (1997).
- [18] В.В. Осипов, А.Ю. Селяков, М. Foygel. ФТП **32**, 2, 221 (1998).
- [19] Ph. Lambin, J.P. Vigneron, A.A. Lucas, P.A. Thiry, M. Liehr, J.J. Pireaux, R. Caudano. Phys. Rev. Lett. **56**, 17, 1842 (1986).
- [20] G.P. Schwartz, G.J. Gualtieri, W.A. Sunder, L.A. Farrow. Phys. Rev. B **36**, 9, 4868 (1987).
- [21] A.C. Maciel, L.C. Campelo Cruz, I.F. Ryah. J. Phys. C.: Solid State Phys. **20**, 20, 3041 (1987).
- [22] E.-K. Suh, D.U. Bartholomew, A.K. Ramdas, S. Rodrigues. Phys. Rev. B **36**, 8, 4316 (1987).
- [23] A. Seilmeyer, I.-J. Hubner, G. Abstreiter, G. Weimann, W. Schlapp. Phys. Rev. Lett. **59**, 12, 1345 (1987).
- [24] M.C. Tatham, J.F. Ryan, C.T. Foxon. Phys. Rev. Lett. **63**, 15, 1637 (1989).
- [25] V.M. Fomin, E.P. Pokatilov. Phys. Stat. Sol. (b) **132**, 1, 69 (1985).
- [26] Е.П. Покатилов, В.М. Фомин, С.И. Берил. Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных структурах и сверхрешетках. Штиинца, Кишинев (1990). 288 с.
- [27] E.P. Pokatilov, S.I. Beril. Phys. Stat. Sol. (b) **118**, 2, 561 (1983).
- [28] A.K. Sood, J. Menendez, M. Cardona, K. Ploog. Phys. Rev. Lett. **54**, 19, 2111 (1985).
- [29] M.V. Klein. IEEE J. Quant. Electron. **22**, 9, 1760 (1986).
- [30] M. Cardona, Superlatt. Microstruct. **5**, 1, 27 (1989).
- [31] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ **13**, 2, 496 (1971).
- [32] L. Schiff. Quantum Mechanics. McGraw-Hill, N.J. (1955).
- [33] B.K. Ridley. Quantum Processes in Semiconductors. Clarendon Press, Oxford (1982).