

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА
ШЕВЧЕНКА

А.О. Подолян, О.О. Коротченков

**ФІЗИКА НИЗЬКОРОЗМІРНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ. ГЕНЕРАЦІЯ ТА
РЕКОМБІНАЦІЯ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ.
ФОТОЕЛЕКТРИЧНИЙ ЕФЕКТ.**

Навчальний посібник
для студентів фізичного факультету
спеціалізацій „Фізика наносистем”, „Фізичне матеріалознавство”
та „Фізика наноструктур в металах та кераміках”

Київ 2018

Подолян А.О., Коротченков О.О.

Фізика низькорозмірних напівпровідників. Генерація та рекомбінація нерівноважних носіїв заряду. Фотоелектричний ефект. Навчальний посібник для студентів фізичного факультету спеціалізацій „Фізика наносистем”, „Фізичне матеріалознавство” та „Фізика наноструктур в металах та кераміках”.

Рецензенти: О.А. Єщенко, д-р фіз.-мат. наук, проф.,
 С.В. Кондратенко, д-р фіз.-мат. наук, проф.

*Рекомендовано до друку Вченою радою фізичного факультету
(протокол № 10 від 16 квітня 2018 р.)*

ЗМІСТ

Передмова	4
1. Основні типи напівпровідникових низькорозмірних структур	5
2. Зонні діаграми поблизу гетеропереходу	8
3. Генерація нерівноважних носіїв заряду	15
3.1. Опис взаємодії електромагнітних хвиль з напівпровідниками.	15
3.2. Опис електронних станів в напівпровідникових наноструктурах.	22
3.3. Генерація нерівноважних носіїв заряду в напівпровідникових квантових ямах.	27
3.3.1. Міжзонні переходи в квантових ямах.	30
3.3.2. Міжпідзонні переходи в межах зони провідності в квантових ямах.	37
4. Рекомбінація нерівноважних носіїв заряду	43
4.1. Фотоелектричний ефект. Поверхнева рекомбінація нерівноважних носіїв заряду	43
4.2. Поверхнева фото-е.р.с. у структурі із квантовими ямами	53
4.3. Дослідження оптичних переходів носіїв заряду в квантових ямах методом конденсаторної фото-е.р.с.	59
Використана література	62

Передмова

Навчальний посібник „Фізика низькорозмірних напівпровідників. Генерація та рекомбінація нерівноважних носіїв заряду. Фотоелектричний ефект” призначений для студентів фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка, які навчаються за спеціалізаціями „Фізика наносистем”, „Фізичне матеріалознавство” та „Фізика наноструктур в металах та кераміках”. Посібник може бути корисним також студентам і аспірантам інших університетів, що спеціалізуються у фізиці твердого тіла.

Цей посібник є результатом узагальнення частини навчального матеріалу, який автори протягом останніх десяти років викладають у межах спецкурсів „Фізика напівпровідників”, „Фізика низькорозмірних напівпровідникових систем”, „Фізика оптичних та фотоелектричних явищ в наноструктурах” та „Методи експериментальних досліджень напівпровідникових матеріалів” для студентів 4-6 курсів фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Оскільки сьогодні підвищується зацікавленість до напівпровідникових структур, їх фізичних властивостей та перспектив практичного використання як основи електроніки майбутнього, нагальною є потреба у навчальних посібниках, в яких цей матеріал був би систематично і достатньо повно викладений. Тому матеріал посібника фактично наближено до конспекта лекцій із увагою до фізичної суті розглянутих проблем. Робота з посібником передбачає попереднє знайомство з основами квантової механіки та статистичної фізики.

Посібник поділено на чотири розділи. Перший та другий розділи стосуються основних типів напівпровідникових низьковимірних структур та гетеропереходів як основи побудови дискретних низькорозмірних структур. У третьому розділі детально розглянуто фізичні основи процесів генерації нерівноважних носіїв заряду із застосуванням до систем із квантовими ямами. Нарешті, у четвертому розділі аналізуються питання рекомбінації нерівноважних носіїв заряду у квантових ямах та квантових точках, знання яких необхідне для розуміння функціонування фотоприймаючих пристроїв.

1. ОСНОВНІ ТИПИ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НИЗЬКОРОЗМІРНИХ СТРУКТУР

Напівпровідникові квантово-розмірні структури поділяють на квантові ями, квантові дроти, квантові точки, надгратки, дво- та трибар'єрні резонансно-тунельні структури, подвійні квантові ями, антиточки, дельта-леговані структури, квантові мікрорезонатори, фотонні кристали, пористі напівпровідники.

Центральне місце в утворенні низькорозмірних напівпровідників обіймає *гетероперехід*. Гетеропереходом називають контакт між двома різними за хімічною будовою матеріалами, зокрема напівпровідниками. Термін вживається на противагу *p-n* переходу, в якому існує контакт між двома областями одного матеріалу, але з різними домішками донорного та акцепторного типу. При цьому концентрація домішок мала настільки, що вони не змінюють зонної структури матеріалу. Навпаки, гетеропереходи характеризуються зміною положення й ширини забороненої зони при переході від одного напівпровідника до іншого. Основні типи гетеропереходів подано на Рис. 1.1. Розрізняють гетеропереходи трьох типів, залежно від того, чи розташована заборонена зона одного із напівпровідників всередині забороненої зони іншого напівпровідника (гетероперехід типу I на Рис. 1.1), або заборонені зони двох напівпровідників зсунуті одна відносно іншої в конфігурації II чи III.

Подвійний гетероперехід типу I конфігурації A/B/A із прошарком напівпровідника B, достатньо тонким для спостереження розмірного квантування, називають структурою з ізольованою *квантовою ямою* (Рис. 1.2a). Обернена конфігурації B/A/B із тонким прошарком напівпровідника A веде до утворення структури з ізольованим *бар'єром* (Рис. 1.2б).

В першому випадку внутрішній прошарок утворює потенціальну яму, в якій відбуватиметься розмірне квантування електронних та діркових станів. У другому випадку внутрішній прошарок утворює бар'єр для електронів та дірок. Очевидно, що подвійний гетероперехід типу II є структурою із квантовою ямою для одного типу носіїв заряду (для електронів в конфігурації Рис. 1.2в та дірок у

випадку Рис. 1.2з) та бар'єром для носіїв заряду іншого типу (для дірок в конфігурації Рис. 1.2в та електронів у випадку Рис. 1.2з)

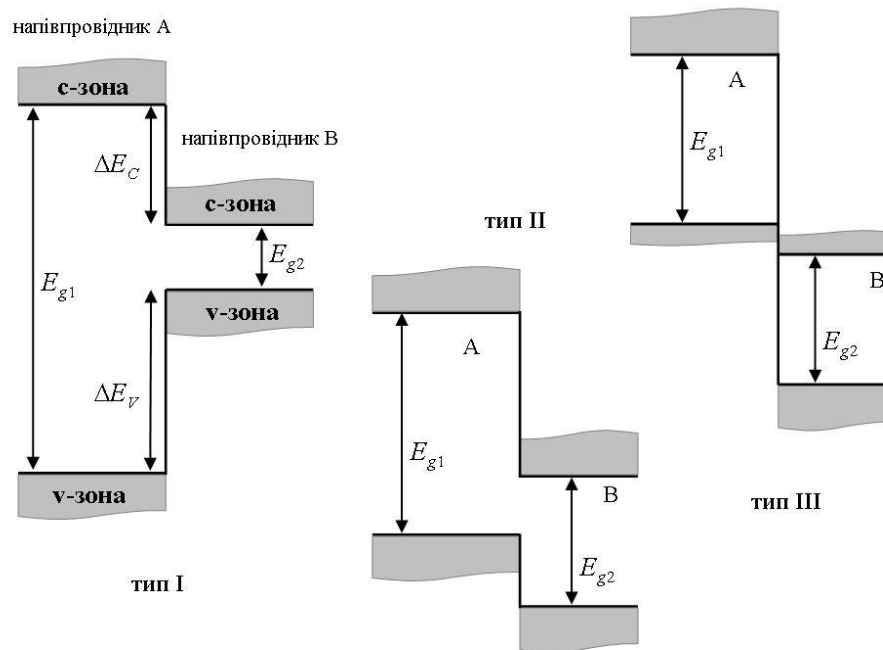


Рис. 1.1. Основні типи гетеропереходів із різним взаємним розташуванням заборонених зон двох напівпровідників E_{g1} і E_{g2} . Тип I відповідає охоплюючій конфігурації, II – сходиноквій конфігурації, а III – конфігурації із розірваною зоною. ΔE_C і ΔE_V – розриви у зонах провідності та валентній на границі двох напівпровідників.

Чергуючи більшу кількість гетеропереходів, можна утворити структуру із двома, трьома чи багатьма квантовими ямами або бар'єрами. Періодична структура із багатьма квантовими ямами, розділеними достатньо вузькими бар'єрними проміжками, називається *надграткою*. Такий термін вживається у випадку, коли носій заряду (електрон або дірка) може достатньо легко тунелювати із однієї квантової ями в іншу і довжина вільного пробігу цього носія в напрямку, перпендикулярному до границі поділу шарів, перевищує період структури. Як наслідок, енергетичні рівні ізольованої квантової ями (див. нижче) розминаються у одновимірні міні-зони. Слід зазначити, що довжина вільного пробігу носіїв заряду різного типу може відрізнятися, зокрема, завдяки відмінностям в ефективній масі електронів та дірок. Тому

періодична структура може бути одночасно надграткою для носіїв заряду одного типу (наприклад, електронів, ефективна маса яких здебільшого менша) і структурою із набором ізолюваних квантових ям для носіїв заряду іншого типу (дірок у даному випадку).

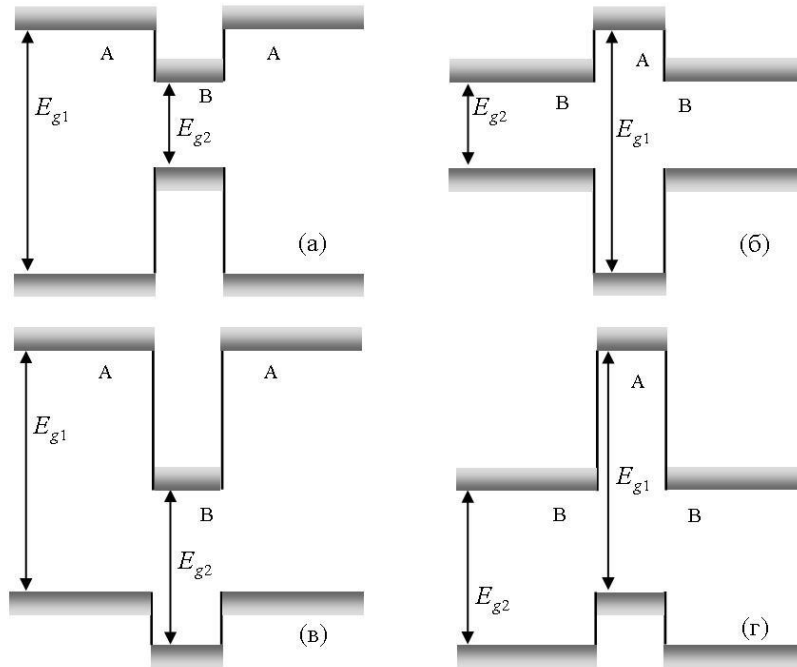


Рис. 1.2. Утворення структур із квантовими ямами та бар'єрами у подвійних гетеропереходах різного типу.

Структура, в якій рух носія заряду обмежений в двох напрямках, називають *квантовими дротами*. Якщо ж рух обмежено в усіх трьох напрямках, кажуть про утворення *квантової точки*.

2. ЗОННІ ДІАГРАМИ ПОБЛИЗУ ГЕТЕРОПЕРЕХОДУ

Залежно від ширини забороненої зони E_g , *електронної спорідненості* χ (енергії електрону зони провідності відносно значення енергії для електрону, що втратив зв'язок із напівпровідником, або *рівня енергії у вакуумі* E_0) та типу легування вузькозонної та широкозонної області гетеропереходу можливі різні комбінації E_g та χ . Деякі з них, що відбивають утворення гетероструктур типу I і II на Рис. 1.1, подано на Рис. 2.1. Діаграми побудовано без врахування вигину енергетичних зон на границі поділу напівпровідників. Для того, щоб врахувати цей вигин при побудові зонних діаграм, можна діяти наступним чином.

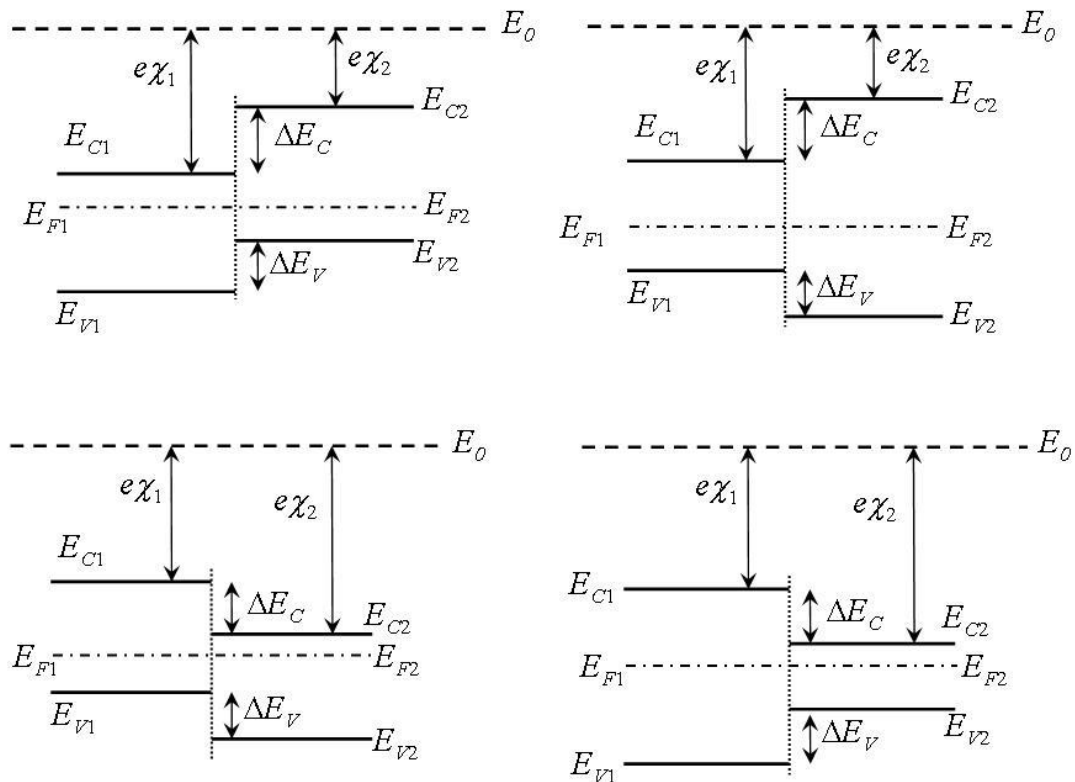


Рис. 2.1. Зонні діаграми гетеропереходів при різних комбінаціях E_g та χ у випадку рівності рівнів Фермі $E_{F1} = E_{F2}$. Вигин енергетичних зон не враховано.

Розглянемо для прикладу гетероперехід, утворений широкозонним напівпровідником p -типу та вузькозонним напівпровідником n -типу.

Енергетичну діаграму двох напівпровідників до утворення контакту подано на Рис. 2.2а. Після з'єднання напівпровідників і утворення гетеропереходу виникає енергетична діаграма, зображена на Рис. 2.2б.

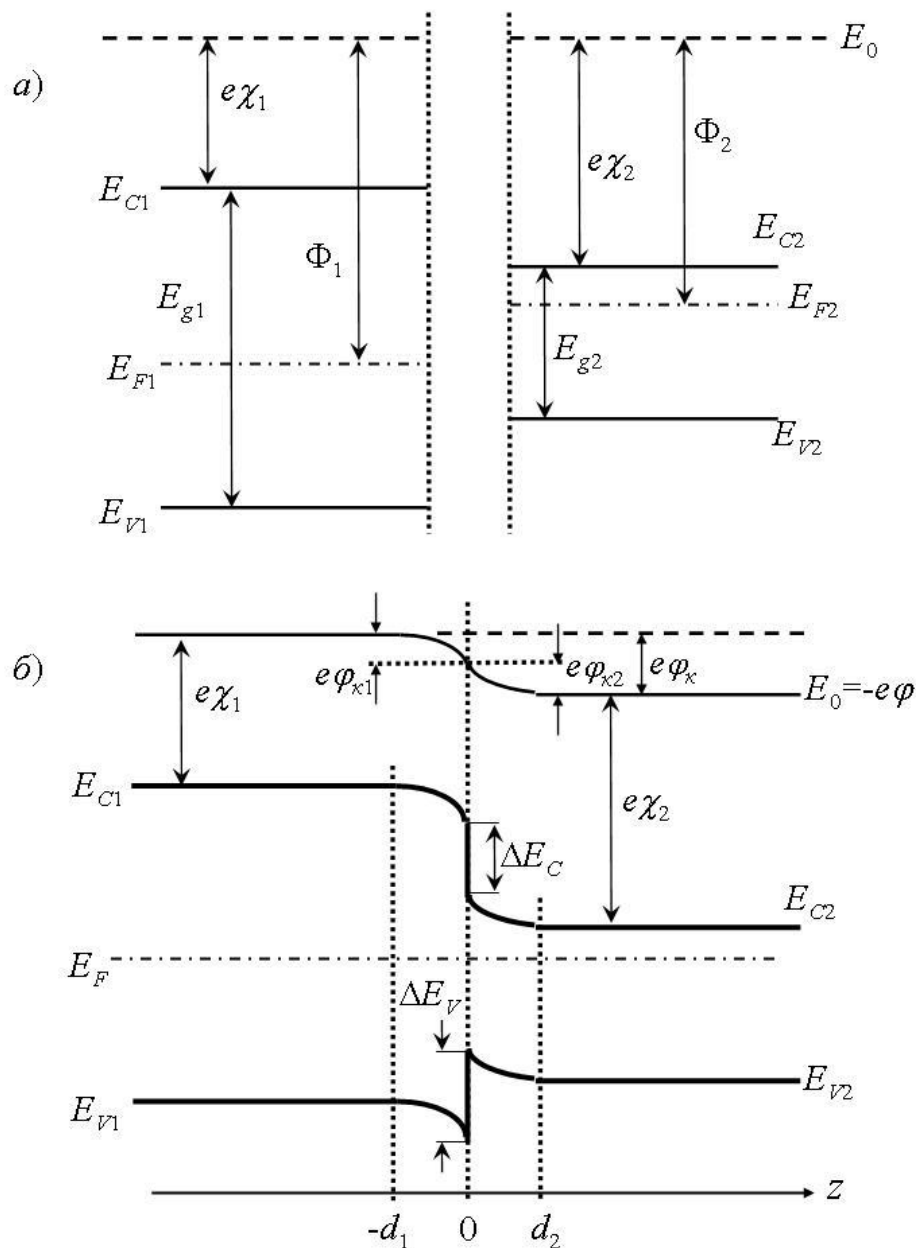


Рис. 2.2. Енергетична діаграма двох напівпровідників до утворення контакту (а) і p - n гетеропереходу (б). E_g – ширина забороненої зони, χ – електронна спорідненість, Φ – робота виходу, φ_k – контактна різниця потенціалів.

У відсутності зовнішньої прикладеної напруги і струму рівень Фермі у двох напівпровідниках вирівнюється і між ними виникає контактна різниця потенціалів $\varphi_k = (\Phi_1 - \Phi_2)/e$. Рівень енергії у вакуумі тепер зобразиться

кривою $E_0 = -e\varphi(z)$, де $\varphi(z)$ – електростатичний потенціал, створюваний шарами об’ємного заряду поблизу границі гетеропереходу. Відкладаючи від рівня E_0 вниз відрізки χ_1 і χ_2 , отримаємо енергію дна зони провідності E_{C1} і E_{C2} в обох напівпровідниках. Оскільки χ_1 і χ_2 загалом різні, на границі гетеропереходу (при $z = 0$) виникає розрив у зоні провідності ΔE_C .

Зауважимо, що такий розрив не виникає у звичайному p - n переході при контакті однакових напівпровідників із різним типом провідності.

Аналогічно, відкладаючи від рівня $E_C(z)$ вниз відрізки E_{g1} і E_{g2} , отримаємо енергію краю валентної зони E_{V1} і E_{V2} . У валентній зоні також утворюється розрив величиною ΔE_V . В залежності від співвідношення між електронними спорідненостями χ_1 і χ_2 та величинами ширини заборонених зон E_{g1} і E_{g2} , ці розриви можуть мати вигляд “стінки”, як це спостерігається для ΔE_C на Рис. 2.2б, чи “гачка” (ΔE_V).

На Рис. 2.3 зображено інший приклад – n - n гетеропереходу, коли, навпаки, “крюк” виникає в зоні провідності, а “стінка” – у валентній зоні. При цьому рівень Фермі E_F в околиці розриву ΔE_C може потрапити в зону провідності і, відповідно, електронний газ у заштрихованій на Рис. 2.3 області стає виродженим.

Повна контактна різниця потенціалів φ_k розподіляється між двома напівпровідниками на частини φ_{k1} і φ_{k2} (Рис. 2.3б). Використовуючи рівняння Пуассона та незалежно обчислюючи густину об’ємного заряду ρ , можна знайти просторовий розподіл потенціалу у двох напівпровідниках, що в одновимірному випадку дає залежності $\varphi_1(z, \varphi_{k1})$ і $\varphi_2(z, \varphi_{k2})$. Користуючись умовою неперервності нормальної компоненти вектору електричного зміщення $D = \varepsilon\varepsilon_0 E$ (E – напруженість електричного поля) на межі двох напівпровідників, отримаємо:

$$\varepsilon_1 \left. \frac{d\varphi_1}{dz} \right|_{z=0} = \varepsilon_2 \left. \frac{d\varphi_2}{dz} \right|_{z=0}, \quad (2.1)$$

звідки знайдемо φ_{k1} і φ_{k2} . Це, у свою чергу, дозволяє знайти розподіл потенціалу $\varphi(z)$ та розриви зон ΔE_C та ΔE_V .

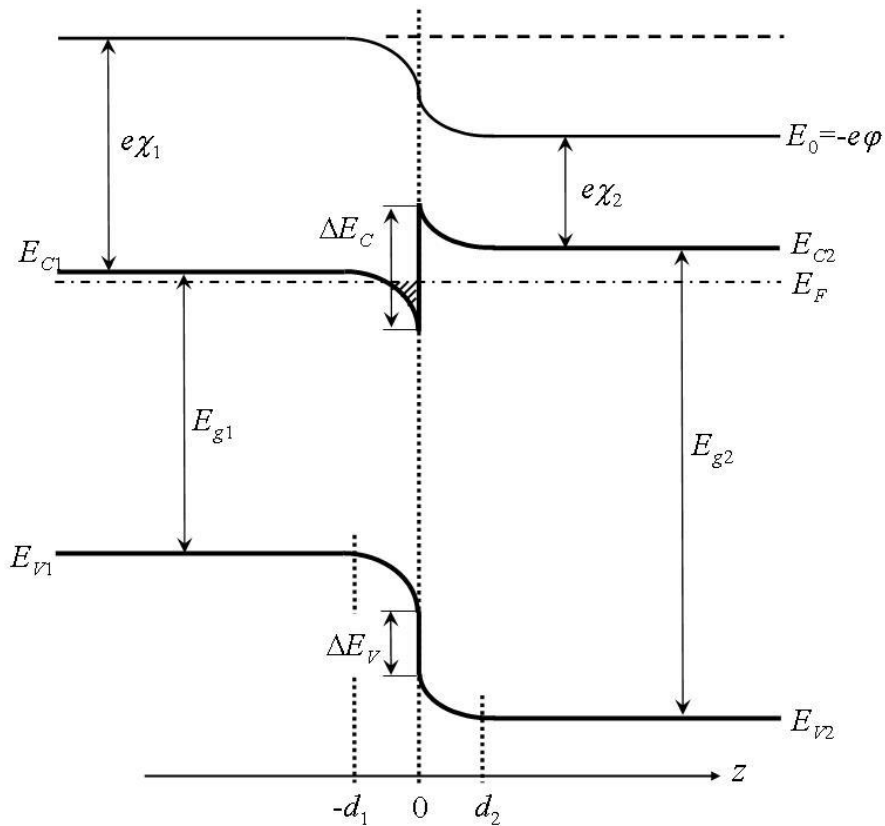


Рис. 2.3. Приклад енергетичної діаграми *n-n* гетеропереходу. Заштрихована область виродженого електронного газу.

Цю загальну схему можна використати для аналізу гетеропереходу, зображеного на Рис. 2.2. У наближенні різкого *p-n* гетеропереходу концентрації акцепторів N_A і донорів N_D є сталими у *p*- і *n*-областях переходу відповідно, а в площині контакту вони змінюються стрибком. Обмежимося випадком мілких домішок та достатньо високих температур, коли домішки можна вважати повністю іонізованими. Тоді розподіл густини об'ємного заряду і потенціалу можна подати у вигляді, зображеному на Рис. 2.4, а сама густина є $\rho = eN_D = en_0$ в *n*-області і $\rho = -eN_A = ep_0$ в *p*-області, де n_0 і p_0 – концентрації електронів і дірок в глибині напівпровідників (*n*- і *p*-типу) за межами областей об'ємного заряду.

Рівняння Пуассона, $\text{div}\vec{D} = \rho$, можна записати для нашого випадку у вигляді:

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad (2.2)$$

а густина об'ємного заряду ρ є:

$$\rho(z) = \begin{cases} en_0 & (0 < z < d_2) \\ 0 & (z \geq d_2) \\ -ep_0 & (-d_1 < z \leq 0) \\ 0 & (z \leq -d_1) \end{cases}, \quad (2.3)$$

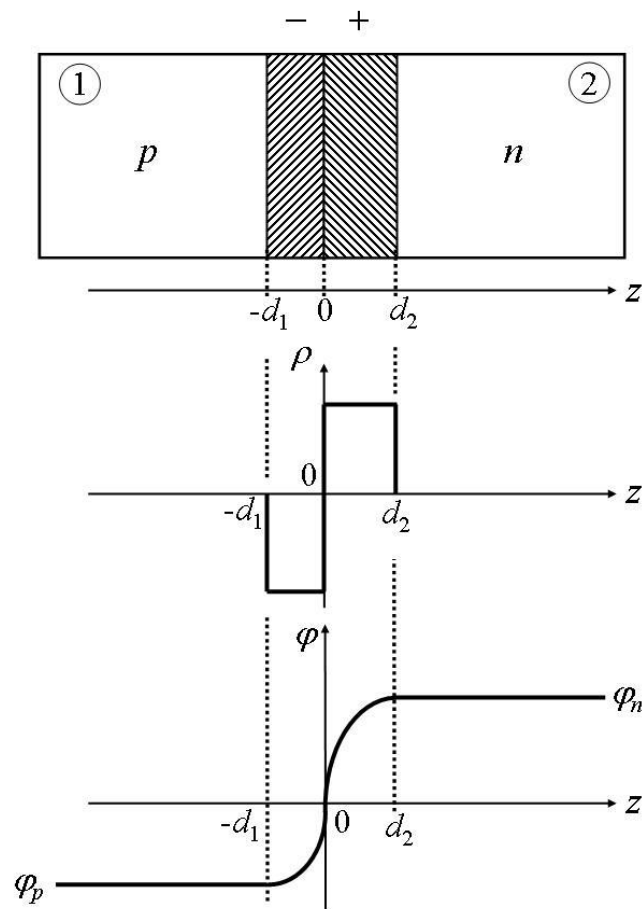


Рис. 2.4. Розподіл густини об'ємного заряду $\rho(z)$ і потенціалу $\varphi(z)$ в моделі різкого p - n гетеропереходу. Напівпровідник p -типу відповідає напівпровіднику 1, а n -типу – напівпровіднику 2 на Рис. 2.2.

Інтегруючи рівняння (2.2), отримаємо для областей об'ємного заряду в напівпровідниках 1 і 2:

$$\frac{d\varphi_1}{dz} = \frac{ep_0}{\varepsilon_1\varepsilon_0} z + B_1, \quad (2.4-1)$$

$$\frac{d\varphi_2}{dz} = -\frac{en_0}{\varepsilon_2\varepsilon_0} z + B_2. \quad (2.4-2)$$

Для визначення B_1 і B_2 скористаємось відсутністю електричного поля на межі областей об'ємного заряду, тобто $-d\varphi_1/dz = 0$ при $z = -d_1$, а $-d\varphi_2/dz = 0$ при $z = d_2$. Тоді:

$$\frac{d\varphi_1}{dz} = \frac{ep_0}{\varepsilon_1\varepsilon_0} (z + d_1), \quad (2.5-1)$$

$$\frac{d\varphi_2}{dz} = \frac{en_0}{\varepsilon_2\varepsilon_0} (-z + d_2). \quad (2.5-2)$$

Інтегруючи ці вирази ще раз, одержимо:

$$\varphi_1 = \frac{ep_0}{2\varepsilon_1\varepsilon_0} (z + d_1)^2 + C_1, \quad (2.6-1)$$

$$\varphi_2 = -\frac{en_0}{2\varepsilon_2\varepsilon_0} (z - d_2)^2 + C_2. \quad (2.6-2)$$

Оскільки в глибині напівпровідників $\varphi_1 = \varphi_p$ та $\varphi_2 = \varphi_n$ (див. Рис. 2.4), остаточно маємо:

$$\varphi_1 = \varphi_p + \frac{ep_0}{2\varepsilon_1\varepsilon_0} (z + d_1)^2, \quad (2.7-1)$$

$$\varphi_2 = \varphi_n - \frac{en_0}{2\varepsilon_2\varepsilon_0} (z - d_2)^2. \quad (2.7-2)$$

Підставивши ці вирази для φ_1 і φ_2 у вираз (2.1), отримаємо співвідношення товщин d_1 і d_2 областей об'ємного заряду:

$$\frac{d_1}{d_2} = \frac{n_0}{p_0}. \quad (2.8)$$

Далі, контактні різниці потенціалів φ_{k1} і φ_{k2} запишемо у вигляді $\varphi_{k1} = \varphi_1(0) - \varphi_p$ і $\varphi_{k2} = \varphi_n - \varphi_2(0)$ (див. Рис. 2.2б). Підставивши у ці вирази φ_1 і φ_2 із (2.7-1) та (2.7-2) при $z = 0$ знайдемо

$$\varphi_{k1} = \frac{ep_0}{2\varepsilon_1\varepsilon_0} d_1^2, \quad (2.9-1)$$

$$\varphi_{k2} = \frac{en_0}{2\varepsilon_2\varepsilon_0} d_2^2, \quad (2.9-2)$$

Звідки, враховуючи співвідношення (2.8), знайдемо:

$$\frac{\varphi_{k1}}{\varphi_{k2}} = \frac{\varepsilon_2 p_0}{\varepsilon_1 n_0} \frac{d_1^2}{d_2^2} = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \frac{n_0}{p_0}. \quad (2.10)$$

Нарешті, записавши $\varphi_k = \varphi_{k1} + \varphi_{k2}$ у вигляді суми (2.9-1) і (2.9-2) та знов скориставшись співвідношенням (2.8), знайдемо:

$$d_1 = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_1\varepsilon_2\varphi_k}{e(n_0\varepsilon_2 + p_0\varepsilon_1)} \frac{n_0}{p_0}}, \quad (2.11-1)$$

$$d_2 = \frac{p_0}{n_0} d_1 = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_1\varepsilon_2\varphi_k}{e(n_0\varepsilon_2 + p_0\varepsilon_1)} \frac{p_0}{n_0}}. \quad (2.11-2)$$

Таким чином, виразами (2.7-1) і (2.7-2) визначено розподіл потенціалу $\varphi(z)$ в напівпровідниках 1 і 2, а також і вигин енергетичних зон в області об'ємного заряду $-e\varphi(z)$, виразами (2.11-1) і (2.11-2) – товщину шарів об'ємного заряду d_1 і d_2 , а виразом (2.10) – співвідношення контактних різниць потенціалів φ_{k1} і φ_{k2} в обох напівпровідниках.

3. ГЕНЕРАЦІЯ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ

3.1. Опис взаємодії електромагнітних хвиль з напівпровідниками.

В класичній електродинаміці взаємодія електрона з електромагнітним полем хвилі описується гамільтоніаном:

$$H = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) - e\varphi \quad (3.1)$$

де φ та \vec{A} - скалярний та векторний потенціали електромагнітного поля, а $V(\vec{r})$ - кристалічний потенціал напівпровідника. Якщо скористатись умовою калібровки Кулона:

$$\varphi = 0 \quad (3.2-1)$$

$$\operatorname{div}\vec{A} = 0 \quad (3.2-2)$$

тоді напруженості електричної та магнітної складових поля виражаються через векторний потенціал в наступному вигляді:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (3.3-1)$$

$$\vec{B} = \operatorname{rot}\vec{A} \quad (3.3-2)$$

Розглянемо плоску електромагнітну хвилю, для якої:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} A_0 \vec{a} \left(e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \right) = A_0 \vec{a} \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t), \quad (3.4)$$

де одиничний вектор \vec{a} задає поляризацію хвилі.

Після підстановки (3.4) у (3.3-1) та (3.3-2) шляхом нескладних перетворень отримуємо:

$$\vec{E} = -A_0 \vec{a} \omega \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \quad (3.5-1)$$

$$\vec{B} = -A_0 [\vec{k}, \vec{a}] \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \quad (3.5-2)$$

Потік енергії, що переноситься електромагнітною хвилею, описується вектором Пойнтінга:

$$\vec{S} = [\vec{E}, \vec{H}] = \frac{1}{\mu\mu_0} [\vec{E}, \vec{B}] \quad (3.6)$$

Розглядаючи немагнітні напівпровідники ($\mu = 1$) після підстановки (3.5-1) та (3.5-2) у (3.6) для потоку енергії електромагнітної хвилі отримаємо:

$$\vec{S} = \frac{A_0^2 \omega}{\mu_0} \vec{k} \sin^2(\vec{k} \vec{r} - \omega t) \quad (3.7)$$

Скориставшись визначенням інтенсивності світлової хвилі отримаємо:

$$I = \left\langle \vec{S} \right\rangle_t = \frac{A_0^2 \omega}{2\mu_0} k, \quad (3.8)$$

де символом $\langle \dots \rangle_t$ позначено операцію усереднення за часовою координатою.

За проміжок часу dt через елементарну поверхню dS , перпендикулярну до напрямку розповсюдження хвилі, переноситься енергія:

$$dW = IdSdt \quad (3.9)$$

З іншого боку, розглядаючи світлову хвилю як потік фотонів з енергією $E = \hbar\omega$ і швидкістю \vec{v} для кожного фотона, dW можна виразити як:

$$dW = n_\phi \hbar \omega v dSdt, \quad (3.10)$$

де n_ϕ - концентрація фотонів в потоці. Прирівнюючи вирази (3.9) і (3.10) отримаємо для інтенсивності світла:

$$I = n_\phi \hbar \omega v \quad (3.11)$$

Враховуючи співвідношення між хвильовим числом k , абсолютним показником заломлення світла напівпровідникового матеріалу n та швидкістю світла у вакуумі $c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$:

$$k = \frac{\omega}{v} = \frac{\omega n}{c}, \quad (3.12)$$

з виразів (3.8) та (3.11) отримаємо:

$$A_0^2 = \frac{2\hbar n_\phi}{\omega n^2 \epsilon_0} \quad (3.13)$$

При послідовному квантовомеханічному розгляді світла векторному потенціалу \vec{A} ставиться у відповідність оператор:

$$\hat{A} = \frac{1}{2} A_0 \vec{a} \left(\hat{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \hat{a}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right), \quad (3.14)$$

де \hat{a}^+ та \hat{a} - оператори народження та знищення фотона. Взаємодіючій електронно-фотонній системі в цьому випадку ставиться у відповідність оператор гамільтона:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p} + e\hat{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) + \hat{H}_\phi, \quad (3.15)$$

де $\hat{H}_\phi = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$ - оператор гамільтона для фотонної підсистеми.

Вважаючи поле падаючої хвилі настільки малим, що квадратичним членом по \hat{A} можна знехтувати і враховуючи, що оператори \hat{p} і \hat{A} комутують між собою в силу умови (3.2-2), з виразу (3.15) отримаємо:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_\phi + \frac{e}{m} \hat{A} \hat{p}, \quad (3.16)$$

де $\hat{H}_e = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ - оператор гамільтона, що описує рух електрона в кристалічному потенціалі $V(\vec{r})$. Останній доданок виразу (3.16) описує взаємодію світла з електронами в напівпровіднику, а саме, *взаємодію одного фотона з одним електроном*. В умовах малої інтенсивності падаючої хвилі цей доданок можна розглядати як мале збурення. В подальшому будемо позначати його оператором збурення $\hat{W}(\vec{r})$.

Щоб отримати явний вигляд оператора \hat{A} потрібно у виразі (3.13) покласти:

$$n_\phi = \frac{N_\phi = 1}{V} = \frac{1}{V}, \quad (3.17)$$

де V - об'єм, зайнятий електромагнітним полем. Після підстановки у вираз (3.14) отримуємо:

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega n^2 \epsilon_0 V}} \vec{a} \left(\hat{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \hat{a}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right) \quad (3.18)$$

Остаточний вираз для оператора збурення набуває вигляду:

$$\hat{W}(\vec{r}) = \frac{e}{m} \hat{A} \hat{p} = \frac{e}{2m} \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega n^2 \varepsilon_0 V}} \vec{a} \left(\hat{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \hat{a}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right) \hat{p} \quad (3.19)$$

Якщо враховувати лише перший доданок у дужках виразу (3.19), тоді оператор $\hat{W}(\vec{r})$ буде описувати процес взаємодії світла з електроном напівпровідника, в результаті якого відбувається поглинання фотона і перехід електрона в новий стан з більшим значенням енергії. Якщо ж враховувати лише другий доданок, тоді оператором $\hat{W}(\vec{r})$ описується процес взаємодії світла з електроном напівпровідника, результатом якого буде випромінювання електроном фотона і перехід електрона в стан з меншим значенням енергії.

Згідно з золотим правилом Фермі, записаним в діраковських позначеннях, імовірність переходу системи в одиницю часу зі стану $|i\rangle$ у стан $|f\rangle$ під дією збурення $\hat{W}(\vec{r})$ визначається виразом:

$$p_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{W} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (3.20)$$

де $\langle f | \hat{W} | i \rangle$ - матричний елемент переходу між станами $|i\rangle$ з енергією E_i та $|f\rangle$ з енергією E_f .

Розглядаючи процес взаємодії світла з поглинанням фотона, для енергії початкового і кінцевого станів можна записати:

$$E_i = E_{ei} + \hbar\omega \left(N_\Phi + \frac{1}{2} \right) \quad (3.21-1)$$

$$E_f = E_{ef} + \hbar\omega \left((N_\Phi - 1) + \frac{1}{2} \right), \quad (3.21-2)$$

де E_{ei} та E_{ef} - енергії початкового та кінцевого станів електрона в відповідних зонах, N_Φ - початкова кількість фотонів до взаємодії.

Вводячи позначення:

$$W_0 = \frac{e}{2m} \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega n^2 \varepsilon_0 V}} \quad (3.22)$$

та враховуючи (3.21-1) і (3.21-2), для імовірності переходу в одиницю часу зі стану $|i\rangle$ у стан $|f\rangle$ з поглинанням фотона з виразу (3.20) отримаємо:

$$p_{if}^a = \frac{2\pi}{\hbar} |W_0|^2 \left| \left\langle f | \vec{a} \hat{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} | i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{ef} - E_{ei} - \hbar\omega) \quad (3.23)$$

Враховуючи, що хвильові функції початкового $|i\rangle$ та кінцевого $|f\rangle$ станів виражаються у вигляді добутків хвильових функцій фотонної підсистеми та блохівських хвильових функції електрона $|\vec{k}_i\rangle$ і $|\vec{k}_f\rangle$, а також враховуючи, що оператор \hat{a} діє лише на хвильову функцію фотонної підсистеми, а оператор \hat{p} – лише на блохівську функцію електрона, з (3.23) отримаємо для імовірності поглинання фотона електроном напівпровідника в одиницю часу:

$$p_{if}^a = \frac{2\pi}{\hbar} |W_0|^2 N_\Phi \left| \left\langle \vec{k}_f | \vec{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} | \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{ef} - E_{ei} - \hbar\omega) \quad (3.24)$$

Розглядаючи процес взаємодії світла з напівпровідником, результатом якого є випромінювання фотона, для енергії початкового і кінцевого станів можна записати:

$$E_i = E_{ei} + \hbar\omega \left(N_\Phi + \frac{1}{2} \right) \quad (3.25-1)$$

$$E_f = E_{ef} + \hbar\omega \left((N_\Phi + 1) + \frac{1}{2} \right) \quad (3.25-2)$$

В цьому випадку для імовірності переходу в одиницю часу зі стану $|i\rangle$ у стан $|f\rangle$ з випромінюванням фотона електроном після підстановки (3.25-1) та (3.25-2) у вираз (3.20) отримаємо:

$$p_{if}^e = \frac{2\pi}{\hbar} |W_0|^2 \left| \left\langle f | \vec{a} \hat{a}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} | i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{ef} - E_{ei} + \hbar\omega) \quad (3.26)$$

Проводячи міркування, аналогічні тим, що привели нас від виразу (3.23) до виразу (3.24), отримаємо для імовірності випромінювання фотона електроном напівпровідника за одиницю часу:

$$p_{if}^e = \frac{2\pi}{\hbar} |W_0|^2 (N_\Phi + 1) \left| \left\langle \vec{k}_f / \vec{a} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{ef} - E_{ei} + \hbar\omega) \quad (3.27)$$

Останній вираз зручно представити у вигляді суми двох доданків:

$$p_{if}^e = p_{if}^{esp} + p_{if}^{est}, \quad (3.28)$$

де

$$p_{if}^{esp} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_0|^2 \left| \left\langle \vec{k}_f / \vec{a} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{ef} - E_{ei} + \hbar\omega) \quad (3.29-1)$$

дає імовірність спонтанного випромінювання фотона електроном напівпровідника в одиницю часу, а

$$p_{if}^{est} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_0|^2 N_\Phi \left| \left\langle \vec{k}_f / \vec{a} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_{ef} - E_{ei} + \hbar\omega) \quad (3.29-2)$$

дає імовірність стимульованого випромінювання фотона електроном напівпровідника в одиницю часу.

Згідно з визначенням коефіцієнта поглинання світла, виразом:

$$-dI = \alpha I(x) dx \quad (3.30)$$

визначається енергія світлової хвилі, яка поглинається в одиницю часу в тонкому шарі dx на відстані x від освітлюваної поверхні в розрахунку на одиничну освітлювану площу. Тоді, позначивши через W повний темп поглинання фотонів з енергією $E = \hbar\omega$ в одиниці об'єму напівпровідника, отримуємо:

$$-\frac{dI}{dx} = \alpha I = W\hbar\omega \quad (3.31)$$

З виразу (3.31) з урахуванням (3.8) отримаємо для коефіцієнту поглинання світла:

$$\alpha = \frac{W\hbar\omega}{I} = \frac{2\mu_0 W\hbar}{N_\Phi A_0^2 k} \quad (3.32)$$

Розрахуємо кількість *прямих переходів* в одиниці об'єму напівпровідника в одиницю часу, в результаті яких *електрон поглинає фотон* і переходить із початкового блохівського стану $|\vec{k}_i\rangle$ у кінцевий блохівський стан $|\vec{k}_f\rangle$:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} p_{if}^a f(\vec{k}_i) (1 - f(\vec{k}_f)) \quad (3.33)$$

У виразі (3.33) підсумовування ведеться по всім можливим блохівським станам, які задовольняють закону збереження енергії:

$$E_{ef} = E_{ei} + \hbar\omega \quad (3.34)$$

Через $f(\vec{k}_i)$ позначено функцію, що описує імовірність заповнення початкового блохівського стану $|\vec{k}_i\rangle$, а через $(1 - f(\vec{k}_f))$ - імовірність того, що кінцевий блохівський стан $|\vec{k}_f\rangle$ не заповнений електроном. Імовірність переходу в одиницю часу p_{if}^a задається виразом (3.24).

Тепер аналогічним чином розрахуємо кількість *зворотніх переходів*, що відбуваються в одиниці об'єму напівпровідника в одиницю часу, в результаті яких *електрон випромінює фотон* і переходить із кінцевого блохівського стану $|\vec{k}_f\rangle$ у початковий блохівський стан $|\vec{k}_i\rangle$:

$$W_{f \rightarrow i} = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} p_{fi}^e f(\vec{k}_f) (1 - f(\vec{k}_i)), \quad (3.35)$$

де підсумовування ведеться по всім можливим блохівським станам, які задовольняють закону збереження енергії (3.34). Імовірність зворотнього переходу в одиницю часу з випромінюванням фотона p_{fi}^e знаходимо з виразу (3.27), враховуючи при цьому, що початковим та кінцевим станами для такого переходу будуть $|\vec{k}_f\rangle$ та $|\vec{k}_i\rangle$, відповідно.

Повний темп поглинання фотонів тепер можна представити виразом:

$$W = W_{i \rightarrow f} - W_{f \rightarrow i} \quad (3.36)$$

Очевидно, що за відсутності освітлення в стані термодинамічної рівноваги $W = 0$. Розглядаючи стан термодинамічної рівноваги, підставимо вирази (3.33) та (3.35) у (3.36). Якщо тепер врахувати, що в стані термодинамічної рівноваги $f(\vec{k}_i)$ та $f(\vec{k}_f)$ - рівноважні функції розподілу Фермі-Дірака, а N_ϕ у виразах

(3.24) та (3.27) виражається через рівноважну функцію розподілу Бозе-Ейнштейна, ми приходимо до співвідношення:

$$\left| \left\langle \vec{k}_f / \bar{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle \vec{k}_i / \bar{a} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_f \right\rangle \right|^2 \quad (3.37)$$

Остаточно з урахуванням (3.37) з виразів (3.22), (3.24), (3.27), (3.33), (3.35) та (3.36) для повного темпу поглинання фотонів отримаємо:

$$W = \frac{2}{V} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{4m^2} \frac{2\hbar}{\omega n^2 \epsilon_0 V} N_{\Phi} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} \left| \left\langle \vec{k}_f / \bar{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 (f(\vec{k}_i) - f(\vec{k}_f)) \delta(E_{ef} - E_{ei} - \hbar\omega) \quad (3.38)$$

Нарешті, підставляючи вираз (3.38) у (3.32) та враховуючи (3.13), ми отримаємо загальний вираз для коефіцієнту поглинання світла в напівпровідниках:

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} \left| \left\langle \vec{k}_f / \bar{a} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} / \vec{k}_i \right\rangle \right|^2 (f(\vec{k}_i) - f(\vec{k}_f)) \delta(E_{ef} - E_{ei} - \hbar\omega), \quad (3.39)$$

де введено позначення:

$$C_0(\omega) = \frac{\pi e^2}{m^2 \omega n^2 \epsilon_0} \quad (3.40)$$

3.2. Опис електронних станів в напівпровідникових наноструктурах.

В одноелектронному наближенні стан електрона в зоні з номером n об'ємного напівпровідникового кристалу описується блохівською хвильовою функцією:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.41)$$

яка є розв'язком рівняння:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (3.42)$$

де $V(\vec{r})$ – періодичний кристалічний потенціал.

Енергію електрона в околі екстремуму зони n в цьому випадку можна представити у вигляді:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \sum_{\alpha, \beta} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} (k_\alpha - k_{\alpha 0})(k_\beta - k_{\beta 0}), \quad (3.43)$$

де $\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta}$ - компоненти тензора обернених ефективних мас, а \vec{k}_0 - задає

положення екстремуму зони n в першій зоні Бріллюена.

В низькорозмірних напівпровідникових структурах на періодичний кристалічний потенціал накладається неперіодичний потенціал $U(\vec{r})$, зумовлений існуванням розриву зон на гетеропереходах, що обмежують просторовий рух електронів, викликаючи ефекти розмірного квантування. У випадку напівпровідникових квантових ям, потенціал $U(\vec{r})$ представляє собою розриви зон на двох гетеропереходах, що утворюють потенціальну яму для носіїв заряду. В цьому випадку стан електрона вже не буде описуватись блохівською функцією вигляду (3.41). Для знаходження хвильової функції та енергетичного спектру носіїв в одноелектронному наближенні слід вже розв'язувати наступне рівняння:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right] \psi_n(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_n(\vec{r}). \quad (3.44)$$

В теорії ефективної маси [3.1] доводиться, що у випадку невідродженої зони (зона провідності) розв'язок рівняння (3.44) можна представити у вигляді:

$$\psi_n(\vec{r}) = F_n(\vec{r}) u_{nk_0}(\vec{r}), \quad (3.45)$$

де $u_{nk_0}(\vec{r})$ - швидкоосцилююча частина блохівської функції в точці екстремуму \vec{k}_0 n -ої зони, а $F_n(\vec{r})$ отримала назву *огинаюча хвильової функції* і є розв'язком рівняння:

$$\left[\sum_{\alpha, \beta} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\beta} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) + U(\vec{r}) \right] F_n(\vec{r}) = [E_n - E_n(\vec{k}_0)] F_n(\vec{r}) \quad (3.46)$$

У випадку виродженої зони (валентна зона) розв'язок рівняння (3.44) набуває вигляду:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{j=1}^6 F_j(\vec{r}) u_{jk_0}(\vec{r}), \quad (3.47)$$

а огинаючі хвильової функції $F_j(\vec{r})$ знаходяться шляхом розв'язку системи рівнянь:

$$\sum_{j'=1}^6 \left[\sum_{\alpha, \beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) + U(\vec{r}) \delta_{jj'} \right] F_{j'}(\vec{r}) = [E - E_j(\vec{k}_0)] F_j(\vec{r}), \quad (3.48)$$

де

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} \frac{p_{j\gamma}^{\alpha} p_{j'\gamma}^{\beta} + p_{j\gamma}^{\beta} p_{j'\gamma}^{\alpha}}{m(E_0 - E_{\gamma})} \right] \quad (3.49)$$

Найбільш просто застосувати описаний вище *формалізм огинаючої хвильової функції* для опису станів електронів провідності в напівпровідниковій квантовій ямі, утвореній двома напівпровідниками з однаковою кристалічною структурою і однаковими сталими ґратки. Будемо також вважати, що в обох напівпровідниках мінімуми зон провідності припадають на точку $\vec{k}_0 = 0$ - центр зони Бріллюена, а ефективні маси електронів провідності- скалярні величини. Типовим прикладом є подвійна гетероструктура $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, де тонкий шар GaAs утворює квантову яму як для електронів зони провідності, так і для дірок валентної зони (Рис.3.1).

За зазначених вище умов швидкоосцилюючі частини блохівських функцій електронів провідності в центрі зони Бріллюена $\vec{k}_0 = 0$ обох напівпровідників вважаються однаковими [3.2]:

$$u_{c0}^A(\vec{r}) = u_{c0}^B(\vec{r}) = u_{c0}(\vec{r}) \quad (3.50)$$

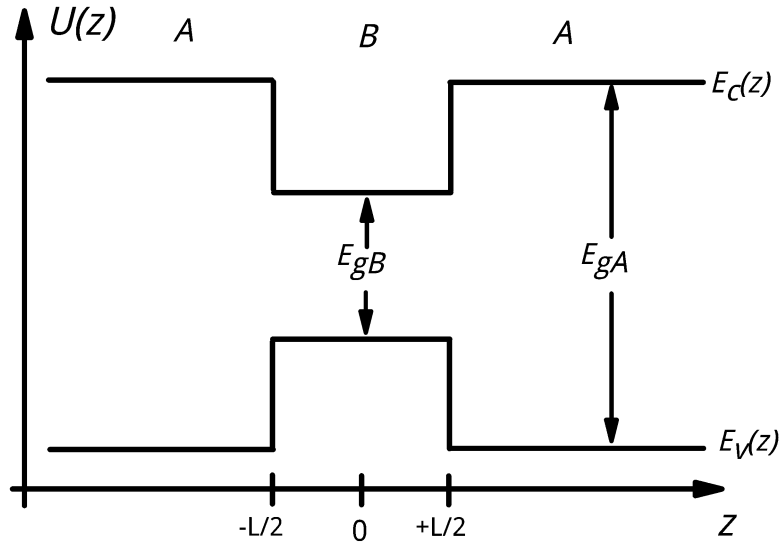


Рис. 3.1. Енергетична діаграма напівпровідникової квантової ями типу $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Вибираючи вісь OZ за напрямок вирощування квантової ями, отримаємо, що потенціал $U(z)$ в рівнянні (3.44) залежить лише від координати z , оскільки просторовий рух електронів провідності обмежується лише в напрямку OZ . В цьому випадку хвильова функція електрона провідності набуває вигляду:

$$\psi_{cn}(\vec{r}) = F_n^{A,B}(\vec{r}) u_{c0}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp} \chi_n^{A,B}(z) u_{c0}(\vec{r}), \quad (3.51)$$

де $\vec{k}_\perp = \vec{i}k_x + \vec{j}k_y$, $\vec{r}_\perp = \vec{i}x + \vec{j}y$, $F_n^A(\vec{r})$ і $\chi_n^A(z)$ - огибаючі функції в матеріалі A , а $F_n^B(\vec{r})$ і $\chi_n^B(z)$ - огибаючі функції в матеріалі B . Огибаюча функція в обох напівпровідниках задовольняє рівнянню:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{A,B}^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right] \chi_n^{A,B}(z) = E_{n0} \chi_n^{A,B}(z) \quad (3.52)$$

На гетерограницях між матеріалами A і B повинні виконуватись типові граничні умови для огибаючої функції [3.2]:

$$\chi_n^A(z = \mp L/2) = \chi_n^B(z = \mp L/2) \quad (3.53-1)$$

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d}{dz} \chi_n^A(z = \mp L/2) = \frac{1}{m_B^*} \frac{d}{dz} \chi_n^B(z = \mp L/2) \quad (3.53-2)$$

Повна енергія електрона провідності визначається виразом:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} + E_{n0}, \quad (3.54)$$

де враховано $m_A^* = m_B^* = m^*$, а E_{n0} - власні значення енергії з рівняння (3.52).

Таким чином, енергетичні стани електронів в квантовій ямі утворюють *двовимірні підзони*, які нумеруються квантовим числом n .

Рівняння (3.52) представляє собою типову задачу про рух частинки в одновимірній потенціальній ямі, розв'язок якої можна знайти в більшості підручників з квантової механіки. В найпростішому випадку прямокутної потенціальної ями, коли потенціал на границях квантової ями прямує до нескінченості:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & |z| < L/2 \\ \infty, & |z| \geq L/2 \end{cases}, \quad (3.55)$$

розв'язок задачі можна отримати в аналітичному вигляді. В цьому випадку рух електронів провідності обмежений матеріалом B і граничні умови (3.53) спрощуються до:

$$\chi_n^B(z = \mp L/2) = 0 \quad (3.56)$$

Незалежними розв'язками рівняння (3.52) будуть:

$$\chi_n^B(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n z) \quad (3.57-1)$$

$$\chi_n^B(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_n z), \quad (3.57-2)$$

де

$$k_n = \left(\frac{2m^* E_{n0}}{\hbar^2} \right)^{1/2}. \quad (3.58)$$

Граничні умови (3.56) накладають умови на можливі значення:

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad (3.59)$$

де $n=1,2,\dots$ - цілі числа. Розв'язкам (3.57-1) відповідають парні n , а розв'язкам (3.57-2)- непарні n . Власні значення енергії в рівнянні (3.52) даються виразом:

$$E_{n0} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* L^2} \quad (3.60)$$

Остаточно, враховуючи вирази (3.51), (3.57-1) та (3.57-2), хвильові функції електронів провідності набувають вигляду:

$$\psi_{cn}^n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\vec{k}_{\perp} \vec{r}_{\perp}} u_{c0}(\vec{r}) \sin(k_n z) \quad (3.61-1)$$

$$\psi_{cn}^{nn}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\vec{k}_{\perp} \vec{r}_{\perp}} u_{c0}(\vec{r}) \cos(k_n z) \quad (3.61-2)$$

З урахуванням виразів (3.54) та (3.60) енергія електронів провідності в квантовій ямі в підзоні з номером n дається виразом:

$$E_n(\vec{k}_{\perp}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* L^2} \quad (3.62)$$

Слід підкреслити, що розрахунок енергетичних рівнів та хвильових функцій дірок в квантових ямах розглянутого вище типу (Рис. 3.1) суттєво ускладнюється тим фактом, що в більшості напівпровідників валентні зони, з яких утворюються двовимірні підзони розмірного квантування для дірок, є виродженими.

3.3. Генерація нерівноважних носіїв заряду в напівпровідникових квантових ямах.

Розглянемо процеси генерації нерівноважних носіїв заряду в подвійній гетероструктурі типу $A/B/A$ (Рис.3.1), яка представляє собою напівпровідникову квантову яму для носіїв обох знаків. Рух вільних носіїв заряду в матеріалі B обмежується потенціальними бар'єрами на гетерограницях між матеріалами A і B . Як було показано в підрозділі 3.2, енергетичні стани носіїв заряду утворюють підзони. Кожна зона об'ємного напівпровідника утворює набір підзон, які будемо нумерувати індексами n для підзон зони провідності, та m - для підзон валентної зони. Розглянемо найбільш важливі процеси поглинання

світла в квантовій ямі, які призводять до генерації вільних носіїв заряду. Схематично таким процесам відповідають два типи оптичних переходів в квантових ямах (Рис.3.2):

- (1) міжзонні переходи;
- (2) міжпідзонні переходи в межах однієї зони.

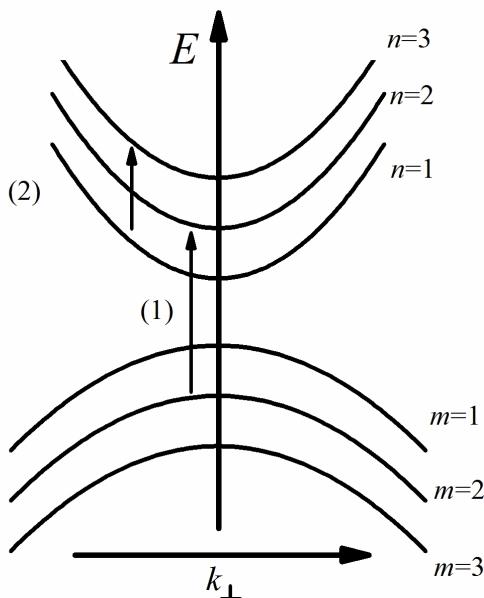


Рис. 3.2. Міжзонні (1) та міжпідзонні (2) оптичні переходи в квантовій ямі.

Для розгляду оптичних переходів зазначених вище типів будемо використовувати найпростішу двозонну модель об'ємного напівпровідника, який утворює квантову яму (матеріал *B* на Рис. 3.1). В рамках даної моделі носії заряду можуть заповнювати лише дві невироджені зони- валентну та зону провідності, з яких в квантовій ямі утворюються підзони дірок та електронів. Дана модель є штучною. Однак результати, отримані в рамках даної моделі, правильно відображають процеси поглинання світла в напівпровідникових квантових ямах, утворених реальними напівпровідниками.

В рамках запропонованої моделі хвильові функції носіїв можна представити виразами:

$$\psi_i(\vec{r}) = F_{il}(\vec{r}) u_{i0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_{\perp l} \vec{r}_{\perp}} u_{i0}(\vec{r}) \chi_l(z) \quad (3.63)$$

для початкового стану, та:

$$\psi_f(\vec{r}) = F_{fl'}(\vec{r}) \mu_{f0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_{\perp l'} \vec{r}_{\perp}} u_{f0}(\vec{r}) \chi_{l'}(z) \quad (3.64)$$

для кінцевого стану, між якими відбуваються оптичні переходи. Індексом i та f позначено зони, яким належать початковий та кінцевий стани. Вони можуть приймати значення c або v для зони провідності та валентної, відповідно. Індексом l та l' позначено номери підзон, між якими відбуваються оптичні переходи. Вони можуть приймати значення m , якщо підзона утворена валентною зоною, або n , якщо підзона утворена зоною провідності. Множник $\frac{1}{\sqrt{S}}$ - нормуючий, де S - площа поперечного перерізу квантової ями.

Розрахуємо матричний елемент:

$$\langle \vec{k}_f | \vec{a} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle = \int \psi_f^*(\vec{r}) \vec{a} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{p} \psi_i(\vec{r}) d^3 \vec{r} \quad (3.65)$$

який входить в загальний вираз (3.39) для коефіцієнту поглинання світла. Для діапазону енергій фотонів $\hbar\omega \sim (0,1 \div 2,0)$ еВ, який найбільш цікавий з точки зору поглинання світла в напівпровідниках, імпульс фотона $\hbar k$ буде набагато меншим за квазіімпульс електрона. Тому при розгляді процесів поглинання світла в квантових ямах ми будемо вважати, що виконується закон збереження:

$$\vec{k}_{\perp l} = \vec{k}_{\perp l'} \quad (3.66)$$

Таке припущення отримало назву *дипольного наближення*. Таким чином, в дипольному наближенні матричний елемент (3.65) набуває вигляду:

$$\langle \vec{k}_f | \vec{a} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle = \langle \vec{k}_f | \vec{a} \hat{p} | \vec{k}_i \rangle = \int \psi_f^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} \psi_i(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \int F_{fl'}^*(\vec{r}) \mu_{f0}^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} F_{il}(\vec{r}) \mu_{i0}(\vec{r}) d^3 \vec{r} \quad (3.67)$$

Той факт, що огинаючі хвильових функцій $F_{il}(\vec{r})$ та $F_{fl'}(\vec{r})$ слабо змінюються в межах елементарної комірки, дозволяє нам у виразі (3.67) перейти від інтегралу по об'єму кристала до суми інтегралів по об'єму елементарної комірки:

$$\int F_{fl'}^*(\vec{r}) \mu_{f0}^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} F_{il}(\vec{r}) \mu_{i0}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \sum_s F_{fl'}^*(\vec{R}_s) F_{il}(\vec{R}_s) \left[\int_{V_s} u_{f0}^*(\vec{r} + \vec{R}_s) \vec{a} \hat{p} u_{i0}(\vec{r} + \vec{R}_s) d^3 \vec{r} \right] + \sum_s F_{fl'}^*(\vec{R}_s) \vec{a} \hat{p} F_{il}(\vec{R}_s) \left[\int_{V_s} u_{f0}^*(\vec{r} + \vec{R}_s) \mu_{i0}(\vec{r} + \vec{R}_s) d^3 \vec{r} \right] , \quad (3.68)$$

де індексом s пронумеровано елементарні комірки, а через \vec{R}_s та V_s позначено вектор трансляції та об'єм елементарної комірки, відповідно. Враховуючи просторову періодичність швидкоосцилюючих частин блохівських функцій:

$$u_{f0}^*(\vec{r} + \vec{R}_s) = u_{f0}^*(\vec{r}), \quad u_{i0}(\vec{r} + \vec{R}_s) = u_{i0}(\vec{r}), \quad (3.69)$$

умову нормування швидкоосцилюючих частин блохівських функцій:

$$\frac{1}{V_s} \int_{V_s} u_{f0}^*(\vec{r}) \mu_{i0}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \delta_{fi} , \quad (3.70)$$

ідентичність всіх елементарних комірок та вводячи позначення:

$$\frac{1}{V_s} \int_{V_s} u_{f0}^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} u_{i0}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \langle u_{f0} / \vec{a} \hat{p} / u_{i0} \rangle , \quad (3.71)$$

з (3.68) отримаємо:

$$\begin{aligned} \int F_{fl'}^*(\vec{r}) \mu_{f0}^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} F_{il}(\vec{r}) \mu_{i0}(\vec{r}) d^3 \vec{r} &= \left(\sum_s F_{fl'}^*(\vec{R}_s) F_{il}(\vec{R}_s) V_s \right) \langle u_{f0} / \vec{a} \hat{p} / u_{i0} \rangle + \\ &+ \left(\sum_s F_{fl'}^*(\vec{R}_s) \vec{a} \hat{p} F_{il}(\vec{R}_s) V_s \right) \delta_{fi} = \\ &= \langle u_{f0} / \vec{a} \hat{p} / u_{i0} \rangle \int F_{fl'}^*(\vec{r}) F_{il}(\vec{r}) d^3 \vec{r} + \delta_{fi} \int F_{fl'}^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} F_{il}(\vec{r}) d^3 \vec{r} \end{aligned} \quad (3.72)$$

де ми знову переходимо від підсумовування по елементарним коміркам до інтегрування по об'єму кристала.

3.3.1. Міжзонні переходи в квантових ямах.

Розглянемо тепер механізм генерації нерівноважних носіїв заряду за рахунок міжзонних переходів, коли початковий стан належить валентній зоні

$i=v$, а кінцевий- зоні провідності $f=c$. Згідно з домовленістю, в цьому випадку перейдемо від індексу l до m - номер підзони валентної зони, з якої відбувається перехід, і від індексу l' до n - номер підзони зони провідності, в яку відбувається оптично стимульований перехід носія заряду.

Враховуючи (3.70) та (3.72) для матричного елементу (3.67) отримаємо:

$$\langle \vec{k}_f / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_i \rangle = \langle \vec{k}_c / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_v \rangle = \langle u_{c0} / \vec{a}\hat{p} / u_{v0} \rangle \int F_{cn}^*(\vec{r}) F_{vm}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (3.73)$$

де вирази для огинаючих функцій набувають вигляду:

$$F_{vm}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_{\perp m} \vec{r}_{\perp}} \chi_m(z) \quad (3.74-1)$$

$$F_{cn}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_{\perp n} \vec{r}_{\perp}} \chi_n(z) \quad (3.74-2)$$

Підстановка (3.74-1) та (3.74-2) у (3.73) дає:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_i \rangle &= \langle u_{c0} / \vec{a}\hat{p} / u_{v0} \rangle \frac{1}{S} \int_S e^{i(\vec{k}_{\perp m} - \vec{k}_{\perp n}) \vec{r}_{\perp}} d^2\vec{r}_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(z) \chi_m(z) dz = \\ &= \langle u_{c0} / \vec{a}\hat{p} / u_{v0} \rangle \delta_{\vec{k}_{\perp m}, \vec{k}_{\perp n}} I_{nm} \end{aligned} \quad (3.75)$$

Тут враховано:

$$\frac{1}{S} \int_S e^{i(\vec{k}_{\perp m} - \vec{k}_{\perp n}) \vec{r}_{\perp}} d^2\vec{r}_{\perp} = \delta_{\vec{k}_{\perp m}, \vec{k}_{\perp n}} \quad (3.76)$$

та введено позначення:

$$I_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(z) \chi_m(z) dz \quad (3.77)$$

Вважатимемо, що ширина забороненої зони напівпровідника B , який утворює квантову яму (див. Рис.3.1), задовольняє умові $E_{gB} \gg kT$. За таких умов очевидно, що в умовах рівноваги всі стани валентних підзон повністю заповнені електронами, а всі стани підзон зони провідності- вільні. Тоді у виразі (3.39) слід покласти:

$$f(\vec{k}_i) = f(\vec{k}_v) = 1, \quad f(\vec{k}_f) = f(\vec{k}_c) = 0 \quad (3.78)$$

Переходячи до позначень енергії початкового та кінцевого станів, між якими відбувається оптичний перехід електрона:

$$E_{ei} = E_{vm}(\vec{k}_{\perp m}) = -\frac{\hbar^2 k_{\perp m}^2}{2m_h^*} + E_{vm0} \quad (3.79-1)$$

$$E_{ef} = E_{cn}(\vec{k}_{\perp n}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp n}^2}{2m_e^*} + E_{cn0} \quad (3.79-2)$$

із загального виразу (3.39) після підстановки матричного елементу (3.75) отримаємо для коефіцієнту поглинання:

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} |\langle u_{c0} / \vec{a} \hat{p} / u_{vo} \rangle|^2 \times \\ \times \sum_{\vec{k}_{\perp m}, \vec{k}_{\perp n}} \sum_{n,m} |I_{nm}|^2 \delta_{\vec{k}_{\perp m}, \vec{k}_{\perp n}} \delta \left(\frac{\hbar^2 k_{\perp n}^2}{2m_e^*} + E_{cn0} + \frac{\hbar^2 k_{\perp m}^2}{2m_h^*} - E_{vm0} - \hbar\omega \right) \quad (3.80)$$

Враховуючи закон збереження двовимірному квазіхвильового вектора електрона:

$$\vec{k}_{\perp m} = \vec{k}_{\perp n} = \vec{k}_{\perp}, \quad (3.81)$$

та вводячи позначення для енергетичної щільності між краями підзон n та m :

$$E_{vm}^{cn} = E_{cn0} - E_{vm0}, \quad (3.82)$$

отримаємо для коефіцієнта поглинання світла:

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} |\langle u_{c0} / \vec{a} \hat{p} / u_{vo} \rangle|^2 \sum_{n,m} |I_{nm}|^2 \sum_{\vec{k}_{\perp}} \delta \left(\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_h^*} + E_{vm}^{cn} - \hbar\omega \right) \quad (3.83)$$

Вводячи зведену ефективну масу:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_h^*} + \frac{1}{m_e^*}, \quad (3.84)$$

та переходячи від підсумовування по \vec{k}_{\perp} до інтегрування:

$$\sum_{\vec{k}_{\perp}} \rightarrow \frac{S}{(2\pi)^2} \int_{\Omega} d^2 \vec{k}_{\perp} = \frac{S}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} 2\pi k_{\perp} dk_{\perp}, \quad (3.85)$$

отримаємо:

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} |\langle u_{c0} / \vec{a} \hat{p} / u_{vo} \rangle|^2 \sum_{n,m} |I_{nm}|^2 \frac{S}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \delta \left(\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu} + E_{vm}^{cn} - \hbar\omega \right) 2\pi k_{\perp} dk_{\perp} \quad (3.86)$$

Для розрахунку інтегралу, що входить до виразу (3.86), зручно ввести нову змінну:

$$\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu} = x \quad (3.87).$$

Після підстановки і проведення розрахунків, ми отримаємо:

$$\alpha(\omega) = \frac{C_0(\omega)}{L} \frac{\mu}{\pi \hbar^2} \left| \langle u_{c0} / \vec{a} \hat{p} / u_{vo} \rangle \right|^2 \sum_{n,m} |I_{nm}|^2 H(\hbar\omega - E_{vm}^{cn}) \quad (3.88)$$

Тут використано, що $V=SL$, де L - товщина квантової ями, та:

$$\int_0^{\infty} \delta\left(x - [\hbar\omega - E_{vm}^{cn}]\right) dx = H(\hbar\omega - E_{vm}^{cn}), \quad (3.89)$$

де $H(x)$ - ступенева функція Хевісайда:

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad (3.90)$$

В отриманому виразі (3.88) для коефіцієнта поглинання світла інтегралом I_{nm} (3.77) визначаються правила відбору для *дозволених міжзонних оптичних переходів* в квантовій ямі. Якщо квантова яма обмежується нескінченно високими потенціальними бар'єрами, тоді $\chi_n(z)$ та $\chi_m(z)$ в інтегралі (3.77) є розв'язками (3.57-1) та (3.57-2) і не залежать від ефективної маси носіїв. В цьому випадку, як неважко переконатися, повинні виконуватись правила відбору:

$$I_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(z) \chi_m(z) dz = \delta_{nm} \quad (3.91)$$

Це означає, що в такій квантовій ямі можливі міжзонні оптичні переходи лише між підзонами валентної зони та зони провідності з *однаковими номерами* $n=t$. В симетричних квантових ямах скінченної глибини дозволеними будуть лише оптичні переходи між підзонами, для яких обидві функції $\chi_n(z)$ та $\chi_m(z)$ будуть мати *однакову парність* по координаті z , тобто, коли виконуються правила відбору:

$$n-t = \text{парне ціле число} \neq 0 \quad (3.92)$$

Нарешті, в *асиметричних квантових ямах* дозволені оптичні переходи між підзонами злюбими m і n . Однак чисельні розрахунки показують [3.5], що інтеграл (3.77) при $m \neq n$ майже завжди набагато менше за одиницю. Таким чином, можна вважати, що помітний внесок в *поглинання світла за рахунок міжзонних оптичних переходів в квантовій ямі* дають лише оптичні переходи між підзонами з однаковими номерами $n=m$ [3.3]. Схематично дозволені та заборонені міжзонні оптичні переходи в квантовій ямі, які задовольняють правилам відбору (3.91), зображені на Рис. 3.3.

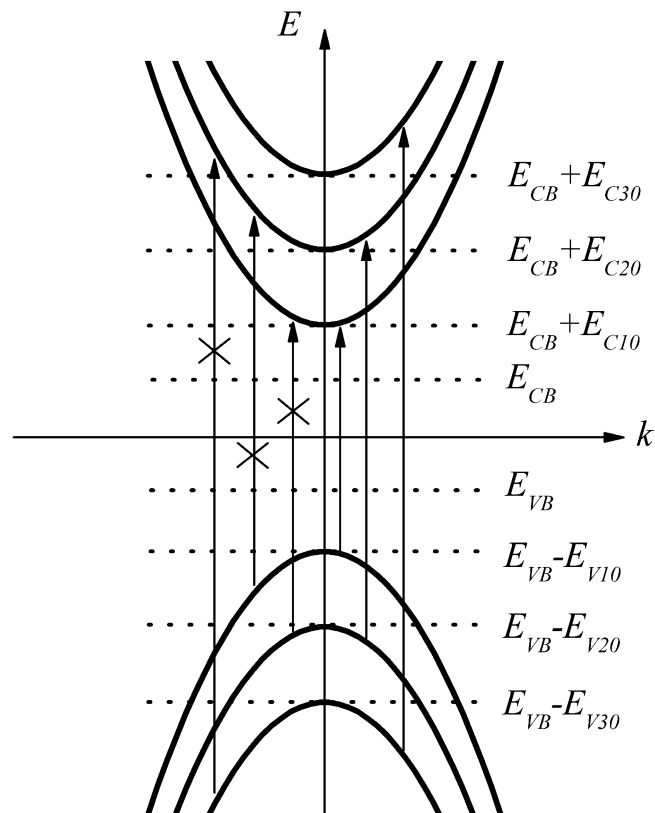


Рис.3.3. Схематичне зображення дозволених (стрілки) та заборонених (перекреслені стрілки) міжзонних оптичних переходів в квантовій ямі.

Доданком $\left| \langle u_{c0} / \bar{a} \hat{p} / u_{v0} \rangle \right|^2$ у виразі (3.88) визначається *поляризаційна залежність* коефіцієнту поглинання світла за рахунок міжзонних оптичних переходів в квантовій ямі. Аналіз показує, що для світла, поляризованого *паралельно* площині квантової ями, для переходів з підзон важких дірок (HH) та легких дірок (LH) в підзони зони провідності (C) маємо:

$$\left| \langle u_{c0} / \vec{a} \hat{p} / u_{vo} \rangle \right|^2 = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{m}{6} E_p, & HH \rightarrow C \\ \frac{1}{2} \frac{m}{6} E_p, & LH \rightarrow C \end{cases} \quad (3.93-1)$$

В той же час, для світла, поляризованого *перпендикулярно* до площини квантової ями, для аналогічних оптичних переходів маємо:

$$\left| \langle u_{c0} / \vec{a} \hat{p} / u_{vo} \rangle \right|^2 = \begin{cases} 0, & HH \rightarrow C \\ 2 \frac{m}{6} E_p, & LH \rightarrow C \end{cases} \quad (3.93-2)$$

У виразах (3.93-1) та (3.93-2) через E_p позначено енергетичний параметр, значення якого протабульовані для різних напівпровідників. В таблиці 3.1 наведено значення цього параметра для деяких найбільш важливих напівпровідників.

Табл. 3.1

Напівпровідник	GaAs	InP	InAs	CdTe
E_p , eВ	25,7	20,9	22,2	20,7

Спираючись на вираз (3.88) і враховуючи правила відбору (3.91) та правила поляризаційної залежності (3.93-1) і (3.93-2), можна зобразити розраховану залежність від енергії фотонів коефіцієнту поглинання світла для *міжзонних оптичних переходів* в квантовій ямі [3.3] (Рис. 3.4)

На Рис. 3.5 зображено експериментально отриману залежність коефіцієнту поглинання світла від енергії фотонів для *міжзонних оптичних переходів* в квантовій ямі [3.4].

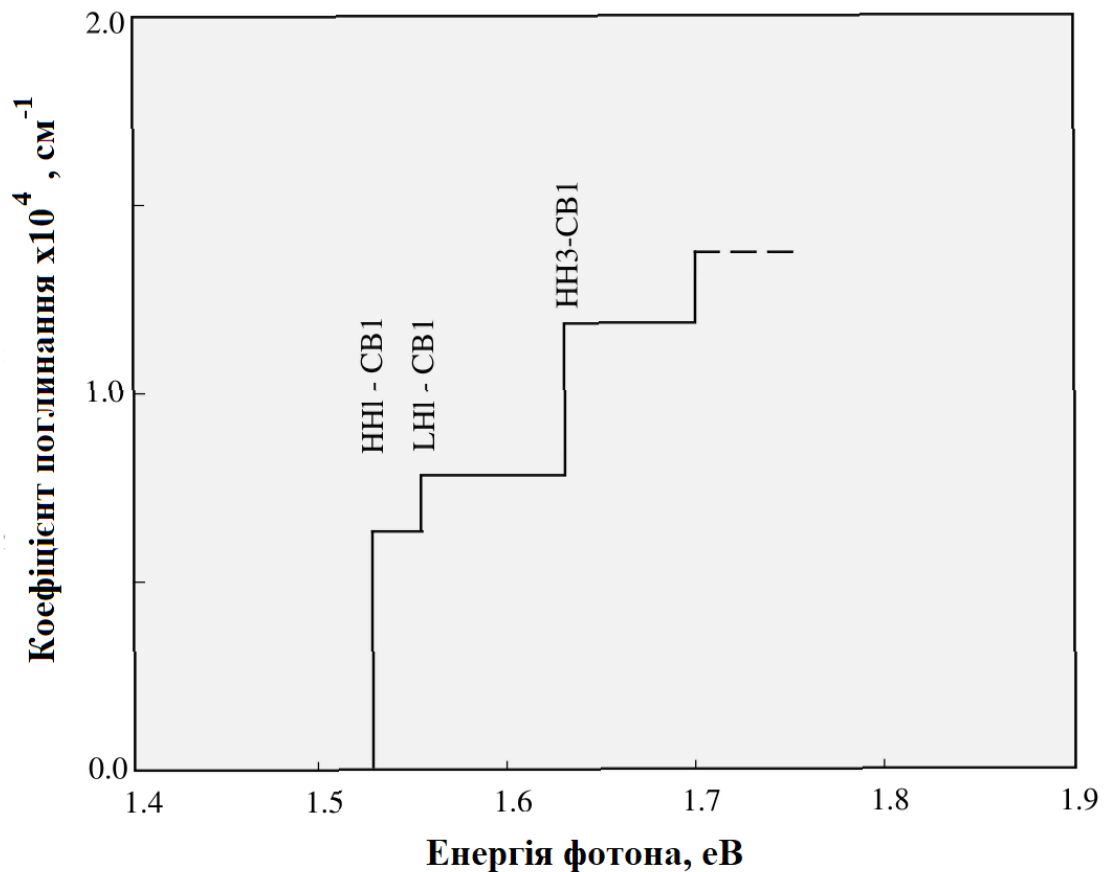


Рис. 3.4. Розрахований коефіцієнт поглинання світла для міжзонних переходів в квантовій ямі $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ товщиною $L=10$ нм для світла, поляризованого паралельно площині квантової ями.

З наведеної залежності видно, що в реальних структурах з квантовими ямами різкі сходинки, які відповідають оптичним переходам між краями підзон, розмиваються. Це розмиття можна пов'язати з непараболічністю підзон розмірного квантування, розсіюванням носіїв заряду на дефектах та неідеальністю інтерфейсів, утворюваних гетеропереходами на границях квантової ями.

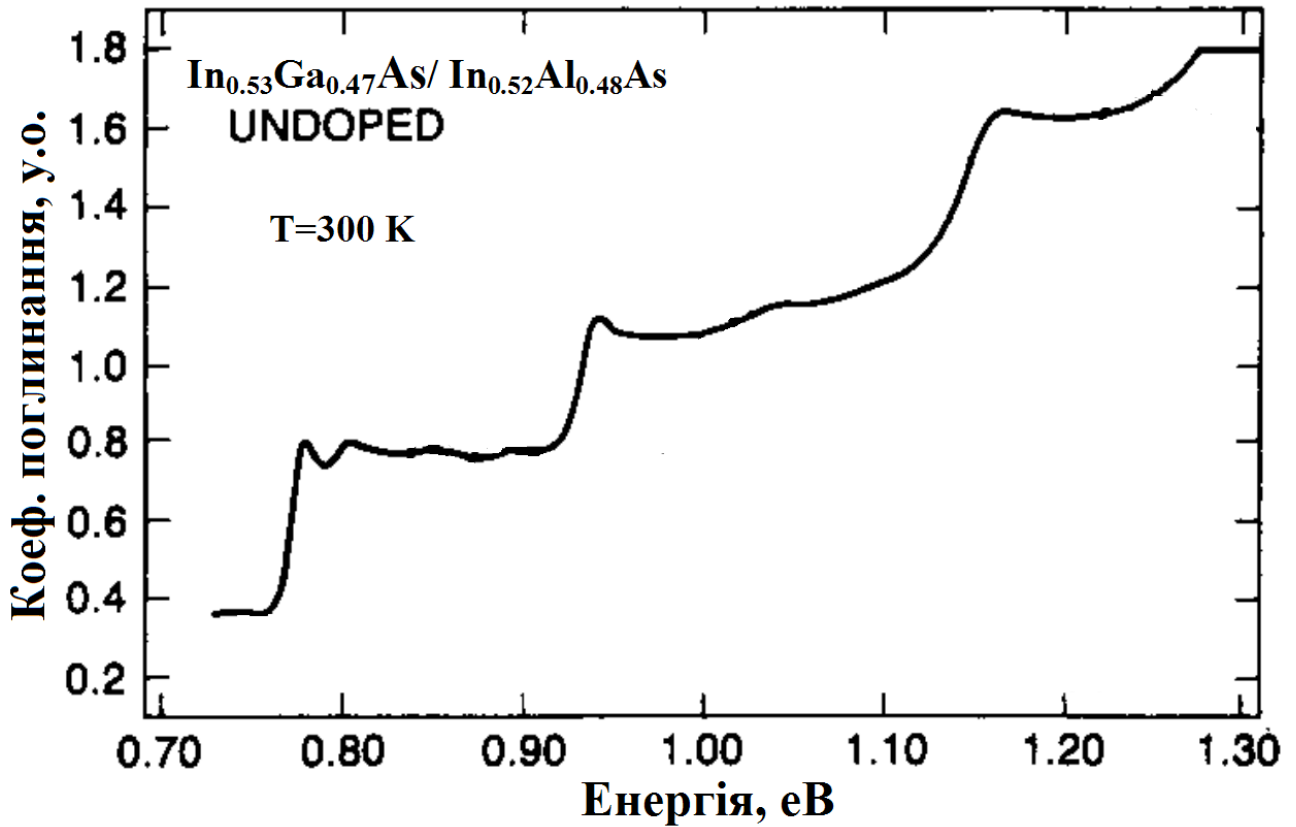


Рис. 3.5. Експериментально виміряний коефіцієнт поглинання світла за рахунок міжзонних переходів в структурі з $\ell = 50$ періодів квантових ям In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As товщиною $L=10$ нм кожна.

3.3.2. Міжпідзонні переходи в межах зони провідності в квантових ямах.

Розглянемо тепер механізм генерації нерівноважних носіїв заряду за рахунок *міжпідзонних переходів*, коли і початковий і кінцевий стани належить одній і тій самій зоні- зоні провідності ($i=f=c$). Згідно з попередньою домовленістю, в цьому випадку потрібно перейти від індексів l та l' до n та n' , причому обидва будуть номерами підзон зони провідності, між якими відбувається оптичні переходи. Для таких переходів в силу симетрії швидкоосцилюючих частин блохівських функцій з (3.71) випливає:

$$\langle u_{f0} | \vec{a} \hat{p} | u_{i0} \rangle = \langle u_{c0} | \vec{a} \hat{p} | u_{c0} \rangle = \frac{1}{V_s V_s} \int u_{c0}^*(\vec{r}) \vec{a} \hat{p} u_{c0}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = 0 \quad (3.94)$$

Для матричного елемента (3.67) після підстановки (3.72) з урахуванням (3.70) та (3.94) отримаємо:

$$\langle \vec{k}_f / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_i \rangle = \langle \vec{k}_{cn'} / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_{cn} \rangle = \int F_{cn'}^*(\vec{r}) \vec{a}\hat{p} F_{cn}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.95)$$

Після підстановки у (3.95) виразів для огинаючих хвильових функцій початкового та кінцевого станів електрона:

$$F_{cn}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_{\perp n} \vec{r}_{\perp}} \chi_n(z) \quad (3.96-1)$$

$$F_{cn'}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_{\perp n'} \vec{r}_{\perp}} \chi_{n'}(z) \quad (3.96-2)$$

отримаємо для матричного елементу:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_i \rangle &= \langle \vec{k}_{cn'} / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_{cn} \rangle = \frac{1}{S} \int_V e^{-i\vec{k}_{\perp n'} \vec{r}_{\perp}} \chi_{n'}^*(z) \vec{a}\hat{p} e^{i\vec{k}_{\perp n} \vec{r}_{\perp}} \chi_n(z) d^3\vec{r} = \\ &= \frac{1}{S} \int_S e^{-i\vec{k}_{\perp n'} \vec{r}_{\perp}} [a_x \hat{p}_x + a_y \hat{p}_y] e^{i\vec{k}_{\perp n} \vec{r}_{\perp}} d^2\vec{r}_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) \chi_n(z) dz + \\ &+ \frac{1}{S} \int_S e^{i(\vec{k}_{\perp n} - \vec{k}_{\perp n'}) \vec{r}_{\perp}} d^2\vec{r}_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \end{aligned} \quad (3.97)$$

Оскільки $n \neq n'$, тоді з урахуванням (3.91) для симетричної квантової ями:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) \chi_n(z) dz \approx 0 \quad (3.98)$$

В той же час по аналогії з (3.76) отримаємо:

$$\frac{1}{S} \int_S e^{i(\vec{k}_{\perp n} - \vec{k}_{\perp n'}) \vec{r}_{\perp}} d^2\vec{r}_{\perp} = \delta_{\vec{k}_{\perp n}, \vec{k}_{\perp n'}} \quad (3.99)$$

Таким чином, з урахуванням (3.98) та (3.99) матричний елемент у (3.97) остаточно набуває вигляду:

$$\langle \vec{k}_f / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_i \rangle = \langle \vec{k}_{cn'} / \vec{a}\hat{p} / \vec{k}_{cn} \rangle = \delta_{\vec{k}_{\perp n}, \vec{k}_{\perp n'}} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \quad (3.100)$$

Переходячи до позначень енергії початкового та кінцевого станів електрона, між якими відбувається оптичний перехід:

$$E_{ei} = E_{cn}(\vec{k}_{\perp n}) = E_{cn0} + \frac{\hbar^2 k_{\perp n}^2}{2m_e^*} \quad (3.101-1)$$

$$E_{ef} = E_{cn'}(\vec{k}_{\perp n'}) = E_{cn'0} + \frac{\hbar^2 k_{\perp n'}^2}{2m_e^*} \quad (3.101-2)$$

із загального виразу (3.39) для коефіцієнту поглинання світла після підстановки матричного елемента (3.100) та виразів для енергії (3.101-1) і (3.101-2) отримаємо:

$$\alpha(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}_{\perp}} \sum_{n, n'} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \right|^2 \times \quad (3.102)$$

$$\times [f(E_{cn}(\vec{k}_{\perp n})) - f(E_{cn'}(\vec{k}_{\perp n}))] \delta(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega)$$

де знову враховано закон збереження двовимірного квазіхвильового вектора електрона:

$$\vec{k}_{\perp n} = \vec{k}_{\perp n'} = \vec{k}_{\perp}$$

Перейдемо в (3.102) від підсумовування по \vec{k}_{\perp} до інтегрування згідно з правилами (3.85), та будемо розглядати оптичні переходи лише для заданої пари підзон з номерами n та n' . Тоді отримаємо:

$$\alpha_{n \rightarrow n'}(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{V} \delta(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega) \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \right|^2 \times \quad (3.103)$$

$$\times \int_0^{\infty} \frac{2S}{(2\pi)^2} [f(E_{cn}(\vec{k}_{\perp})) - f(E_{cn'}(\vec{k}_{\perp}))] 2\pi k_{\perp} dk_{\perp}$$

Оскільки інтеграл по k_{\perp} у виразі (3.103) дорівнює $(N_n - N_{n'})S$, де N_n та $N_{n'}$ – двовимірні концентрації електронів в підзонах зони провідності з номерами n та n' , для коефіцієнту поглинання світла за рахунок *оптичних переходів між підзонами зони провідності* отримуємо:

$$\alpha_{n \rightarrow n'}(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{L} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \right|^2 (N_n - N_{n'}) \delta(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega) \quad (3.104)$$

З аналізу виразу (3.104) випливає, що спектр поглинання за рахунок оптичних переходів з підзони n у підзону n' представляє собою нескінченно вузьку лінію, яка спостерігається при енергії падаючих фотонів:

$$\hbar\omega = E_{cn'0} - E_{cn0} \quad (3.105)$$

Однак приймаючи до уваги непараболічність двовимірних підзон розмірного квантування та процеси розсіювання носіїв заряду на дефектах отримаємо *уширення піка міжпідзонного поглинання*. Для врахування такого уширення δ -функцію у виразі для коефіцієнту поглинання (3.104) замінюють лоренцівським контуром:

$$\delta(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega) \rightarrow L(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega) = \frac{\gamma/\pi}{(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega)^2 + \gamma^2}, \quad (3.106)$$

де 2γ - ширина лінії.

З урахуванням (3.106) для коефіцієнту поглинання остаточно отримаємо:

$$\alpha_{n \rightarrow n'}(\omega) = C_0(\omega) \frac{2}{L} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \right|^2 (N_n - N_{n'}) \frac{\gamma/\pi}{(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega)^2 + \gamma^2} \quad (3.107)$$

Правила відбору та поляризаційна залежність коефіцієнту поглинання

визначаються членом $\left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz \right|^2$ у виразі (3.107). Міжпідзонні

оптичні переходи можуть відбуватися лише при опроміненні світлом зі складовою поляризації в напрямку вісі росту квантової ями (перпендикулярною до площини квантової ями). На Рис. 3.6 зображена одна із можливих схем спостереження спектра міжпідзонного поглинання світла в структурі з набором однакових квантових ям (MQW-структура) – так звана конфігурація Брюстера.

Якщо квантова яма обмежується нескінченно високими потенціальними бар'єрами, тоді огинаючі функції $\chi_n(z)$ та $\chi_{n'}(z)$ задаються виразами (3.57-1)

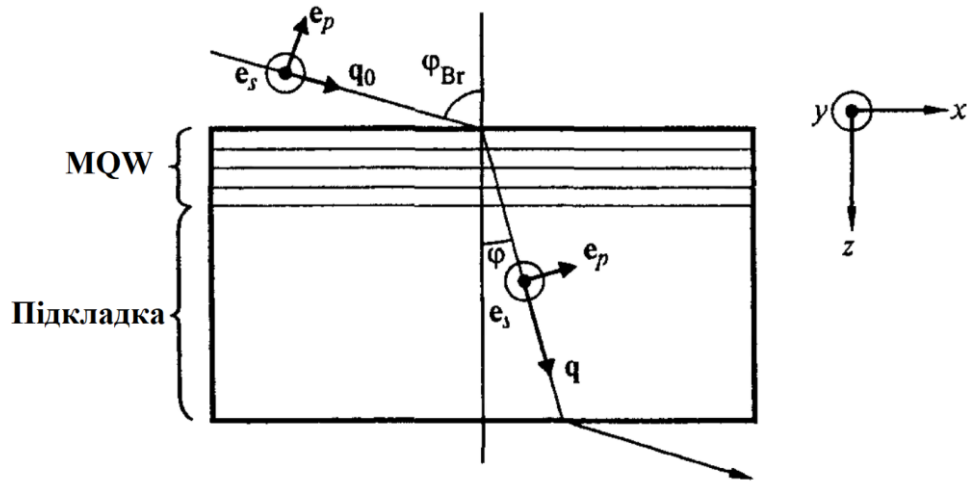


Рис. 3.6. Схема спостереження спектра міжпідзонного поглинання світла MQW- структури в конфігурації Брюстера.

та (3.57-2). Після підстановки та нескладних перетворень отримаємо:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^*(z) a_z \hat{p}_z \chi_n(z) dz = (-i\hbar) \frac{a_z}{L} \left[1 - (-1)^{n+n'} \right] \frac{2nn'}{n'^2 - n^2} \quad (3.108)$$

Аналіз (3.108) дозволяє зробити висновок, що в нескінченно глибоких напівпровідникових квантових ямах дозволені *міжпідзонні оптичні переходи* лише між підзонами з різною парністю, номери яких задовольняють умові:

$$n + n' = \text{непарне ціле число} \quad (3.109)$$

Правила відбору (3.109) будуть також виконуватись і для *симетричних квантових ям скінченої глибини* [3.5]. Якщо ж врахувати, що ефективні маси електронів в матеріалі, що утворює бар'єрний шар m_A^* та в матеріалі, що утворює квантову яму m_B^* , взагалі кажучи різні $m_A^* \neq m_B^*$, тоді стають можливими також *оптичні переходи під дією світла, поляризованого паралельною до площини квантової ями*. Такі переходи можуть відбуватися лише між підзонами однакової парності, коли:

$$n' - n = \text{парне ціле число} \quad (3.110)$$

Проте оцінки показують [3.5], що для квантових ям типу $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ коефіцієнт міжпідзонного поглинання світла з поляризацією, паралельною до площини ями, на декілька порядків менший, ніж для світла, поляризованого перпендикулярно до площини ями.

Нарешті об'єднуючи (3.107) та (3.108) ми отримаємо вираз для коефіцієнту міжпідзонного поглинання світла в нескінченно глибоких напівпровідникових квантових ямах:

$$\alpha_{n \rightarrow n'}(\omega) = C_0(\omega) \frac{2\hbar^2 a_z^2}{L^3} \left[1 - (-1)^{n+n'} \right] \frac{2nn'}{n'^2 - n^2} (N_n - N_{n'}) \frac{\gamma/\pi}{(E_{cn'0} - E_{cn0} - \hbar\omega)^2 + \gamma^2} \quad (3.111)$$

На Рис. 3.7 наведено отриманий експериментально спектр міжпідзонного поглинання світла в структурі з набором однакових квантових ям за рахунок оптичних переходів з підзони $n=1$ у підзону $n'=2$ зони провідності [3.5]. З наведених даних видно, що міжпідзонні оптичні переходи відбуваються під дією світла з далекої інфрачервоної ділянки спектру. Це означає, що на основі напівпровідникових гетероструктур з квантовими ямами можна реалізувати чутливі в далекій інфрачервоної області фотоприймачі, в основі роботи яких лежить механізм генерації нерівноважних носіїв заряду внаслідок міжпідзонного поглинання світла.

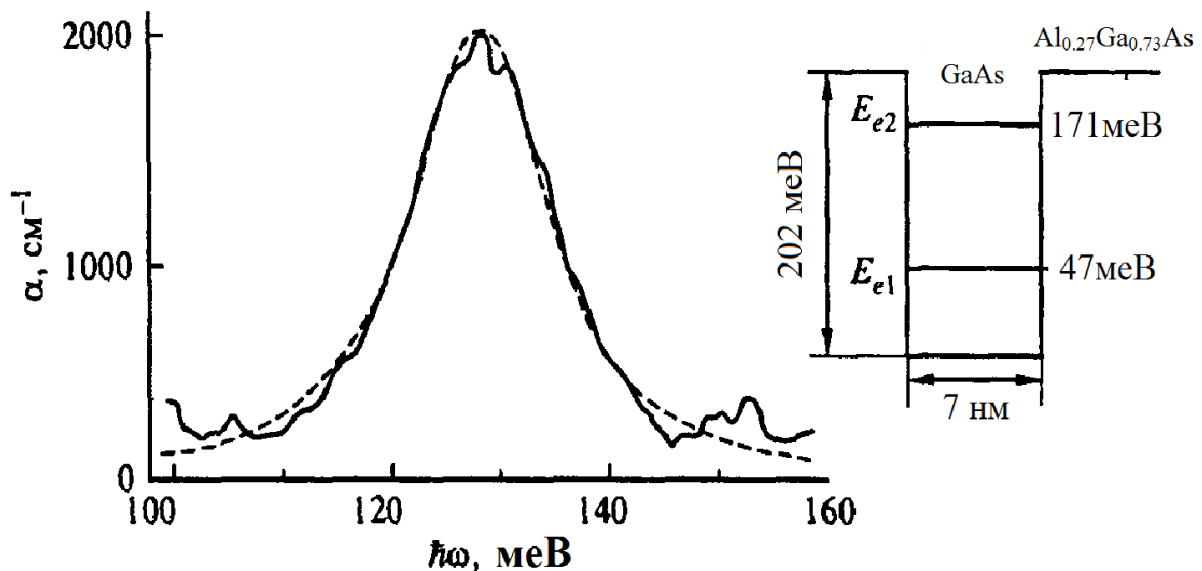


Рис.3.7. Експериментально виміряний коефіцієнт поглинання світла за рахунок міжпідзонних переходів в структурі з $\ell = 100$ періодів квантових ям $\text{Al}_{0.27}\text{Ga}_{0.73}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.27}\text{Ga}_{0.73}\text{As}$ товщиною $L=7$ нм кожна. Суцільна лінія- експеримент, штрихована- апроксимація лоренціаном.

4. РЕКОМБІНАЦІЯ НЕРІВНОВАЖНИХ НОСІЇВ ЗАРЯДУ

4.1. Фотоелектричний ефект. Поверхнева рекомбінація нерівноважних носіїв заряду

Розглянемо найпростішу теоретичну модель фотоелектру. Почнемо з розрахунку розподілу нерівноважних носіїв заряду в зразку. В умовах фотозбудження в напівпровіднику йдуть одночасно три процеси: генерація нерівноважних електронів і дірок під дією світла, їх дифузія і рекомбінація. Якщо освітлення стаціонарне, то через деякий час після його включення в зразку встановиться стаціонарний розподіл нерівноважних носіїв заряду.

Вважатимемо, що зразок однорідний. Тоді очевидно, що в будь-якій площині, паралельній поверхні, що освітлюється, розподіл нерівноважних носіїв буде однорідним. Отже, маємо фактично одновимірну задачу. Розрахуємо нерівноважні добавки до концентрацій електронів і дірок (відповідно $\Delta n(x)$ і $\Delta p(x)$), вважаючи, що вісь x напрямлена уздовж внутрішньої нормалі до освітленої поверхні зразка (Рис. 4.1).

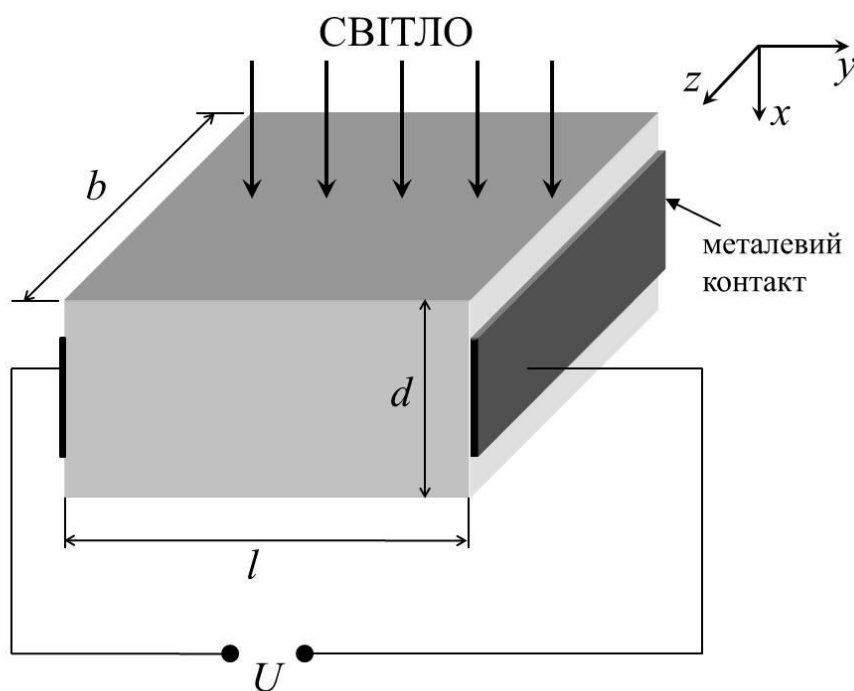


Рис. 4.1. Схема дослідження фотоелектричного ефекту.

Виділимо малий елемент об'єму зразка. В його межах в рамках одновимірної моделі має виконуватися умова електронейтральності, $\Delta n(x) =$

$\Delta p(x)$, що є наслідком однорідності зразка. Крім того, в стаціонарному стані для цього елемента об'єму повинен дотримуватися баланс кількості нерівноважних носіїв заряду – скільки їх з'являється в одиницю часу в цьому елементі, стільки ж і зникає. Нерівноважні носії можуть з'являтися в розглянутій мікрообласті або за рахунок генерації світлом, або за рахунок дифузійного припливу. Витік носіїв з елемента об'єму обумовлений або процесами рекомбінації, або дифузійним відтоком.

Темп генерації нерівноважних носіїв заряду світлом можна описати виразом:

$$\left. \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} \right|_g = \beta \alpha I(x), \quad (4.1)$$

де $I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$ – інтенсивність світла в точці зразка з координатою x (в одиницях кількості фотонів / $\text{см}^2 \text{ с}$), I_0 – інтенсивність світла на вході в зразок (при $x = 0$), α – коефіцієнт поглинання, β – внутрішній квантовий вихід (кожен поглинений фотон породжує β електронно-діркових пар).

Якщо нерівноважні носії заряду розподілено просторово неоднорідно, то виникає їх дифузний потік. У одновимірному випадку цей потік дорівнює $-D \partial \Delta n(x) / \partial x$, де D – коефіцієнт амбіполярної дифузії. Якщо він не постійний уздовж осі x , це викличе дифузионне накопичення (або відтік) носіїв заряду. Їх темп дорівнює

$$\left. \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} \right|_d = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial x} \right) = D \frac{\partial^2 \Delta n(x)}{\partial x^2}. \quad (4.2)$$

Коефіцієнт амбіполярної дифузії в області домішкової провідності визначається рухливістю неосновних носіїв заряду. Зокрема, для напівпровідника p -типу (співвідношення Ейнштейна)

$$D \cong D_n = \frac{\mu_n kT}{e}, \quad (4.3)$$

де μ_n – рухливість електронів (неосновних носіїв заряду в напівпровіднику p -типу), k – стала Больцмана, e – заряд електрону.

Нарешті, темп об'ємної рекомбінації пропорційний величині нерівноважного додатку до концентрації електронів:

$$\left. \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} \right|_r = -\frac{\Delta n(x)}{\tau}, \quad (4.4)$$

де τ – час життя нерівноважних носіїв заряду.

У стаціонарному стані

$$\frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} = \left. \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} \right|_g + \left. \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} \right|_d + \left. \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial t} \right|_r = 0 \quad (4.5)$$

і рівняння балансу для одиниці об'єму набуває вигляду

$$\beta \alpha I_0 e^{-\alpha x} + D \frac{\partial^2 \Delta n(x)}{\partial x^2} - \frac{\Delta n(x)}{\tau} = 0. \quad (4.6)$$

Загальний розв'язок цього неоднорідного диференціального рівняння другого порядку є:

$$\Delta n(x) = A e^{-x/L} + B e^{x/L} + C e^{-\alpha x}, \quad (4.7)$$

де $L = \sqrt{D\tau}$ – дифузійна довжина, константа

$$C = -\frac{\beta \alpha I_0}{D(\alpha^2 - 1/L^2)}, \quad (4.8)$$

а сталі A і B можна визначити із граничних умов. Сформулюємо їх.

Нехай зразок обмежений по осі x двома площинами: $x = 0$ (освітлена поверхня на Рис. 4.1) і $x = d$ (тіньовий бік зразка). Обчислюватимемо зміну кількості нерівноважних носіїв заряду на цих поверхнях в розрахунку на одиницю площі в одиницю часу. Іншою мовою, сформулюємо граничні умови для потоків нерівноважних носіїв заряду. Запишемо умову балансу дифузійного потоку з об'єму до поверхні та потоку поверхневої рекомбінації.

Дифузійний потік з об'єму до поверхні визначається градієнтом концентрації нерівноважних носіїв заряду в глибині зразка на межі з поверхневим шаром (мова йде про приповерхневий шар кінцевої товщини, де наявні специфічні поверхневі рівні, що порушують електронейтральність й

обумовлюють вигин зон біля поверхні, а також відкривається додатковий канал рекомбінації у порівнянні з об'ємним матеріалом. Товщина поверхневого шару надзвичайно мала, вона визначається довжиною екранування Дебая $L_D = \sqrt{\varepsilon kT / ne^2}$, де ε – діелектрична проникність напівпровідника, У той же час, для зручності математичних викладок, вважатимемо товщину поверхневого шару рівною 0). При цьому знак потоку залежить від взаємної орієнтації координатної осі і внутрішньої нормалі до поверхні. Для тіньової поверхні зразка цей потік дорівнює $-D \partial \Delta n(x) / \partial x |_{x=d}$, а для освітлених становить $+D \partial \Delta n(x) / \partial x |_{x=0}$.

Потік поверхневої рекомбінації r_s пропорційний нерівноважній концентрації носіїв в глибині зразка на межі з поверхневим шаром: для освітленої поверхні $r_s = s_1 \Delta n(0)$, для тіньової – $r_s = s_2 \Delta n(d)$. Коефіцієнти пропорційності s_1 і s_2 у цих виразах називається швидкістю поверхневої рекомбінації і вимірюється в см / с. Механізми поверхневої рекомбінації суттєво залежать від способу обробки поверхні зразка, тому в тому самому напівпровідниковому матеріалі величина s може змінюватися на декілька порядків.

Прирівняємо нулю суму дифузійного потоку і потоку поверхневої рекомбінації на освітлених та тіньових гранях зразка, поклавши для простоти розрахунків, що на обох поверхнях швидкість поверхневої рекомбінації однакова ($s_1 = s_2 = s$):

$$D \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial x} |_{x=0} - s \Delta n(0) = 0, \quad (4.9)$$

$$-D \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial x} |_{x=d} - s \Delta n(d) = 0. \quad (4.10)$$

Підставляючи загальний розв'язок (4.7) в граничні умови (4.9) і (4.10), можна знайти значення констант A і B у виразі (4.7). Однак, у загальному випадку значення цих констант є досить громіздкими (див., наприклад, [4.1]). У нашому ж розгляді обмежимося випадком достатньо товстих зразків, для яких $d \gg L$, зосередившись на двох найцікавіших окремих випадках, що відповідають слабкому та сильному поглинанню світла.

Характерна довжина, на якій світло помітно поглинається в напівпровіднику і значно втрачає в інтенсивності, дорівнює $1/\alpha$. Тоді у випадку сильного поглинання світла $1/\alpha \ll L$, а для слабого поглинання – $1/\alpha \gg d$.

У цьому випадку світло генерує нерівноважні носії заряду тільки в тонкому шарі поблизу освітленої поверхні, за межами якого інтенсивність світла мізерно мала. В глибину зразка нерівноважні носії надходять виключно за рахунок дифузії, встигаючи за час їх життя подолати відстань $L = \sqrt{D\tau}$. При $x \gg L$ концентрацією нерівноважних носіїв заряду можна нехтувати, отже, граничну умову на тіньовій поверхні (4.10) можна спростити, записавши $\Delta n(d) = 0$. Підставляючи в цей вираз загальний розв'язок (4.7) і спрямувавши $\alpha \rightarrow \infty$ (сильне поглинання світло) та $d \rightarrow \infty$ (товстий зразок), одержимо $B = 0$. Тоді перша гранична умова (4.9) набуде вигляду:

$$D \left(-\frac{A}{L} - \alpha C \right) = s(A + C). \quad (4.11)$$

Підставивши у цей вираз значення для C у (4.8) та спрямувавши $\alpha \rightarrow \infty$, знайдемо:

$$A = \frac{\beta I_0 L}{D(1+sL/D)}, C = 0. \quad (4.12)$$

Таким чином, для випадку сильного поглинання світла розподіл концентрації нерівноважних носіїв заряду задається монотонно спадаючою експонентою:

$$\Delta n(x) = \frac{\beta I_0 L}{D(1+S)} e^{-x/L}, \quad (4.13)$$

де введено позначення $S = sL/D$ для безрозмірної швидкості поверхневої рекомбінації. Зменшення швидкості поверхневої рекомбінації збільшує концентрацію нерівноважних носіїв, не змінюючи характеру її розподілу за зразком (Рис. 4.2а).

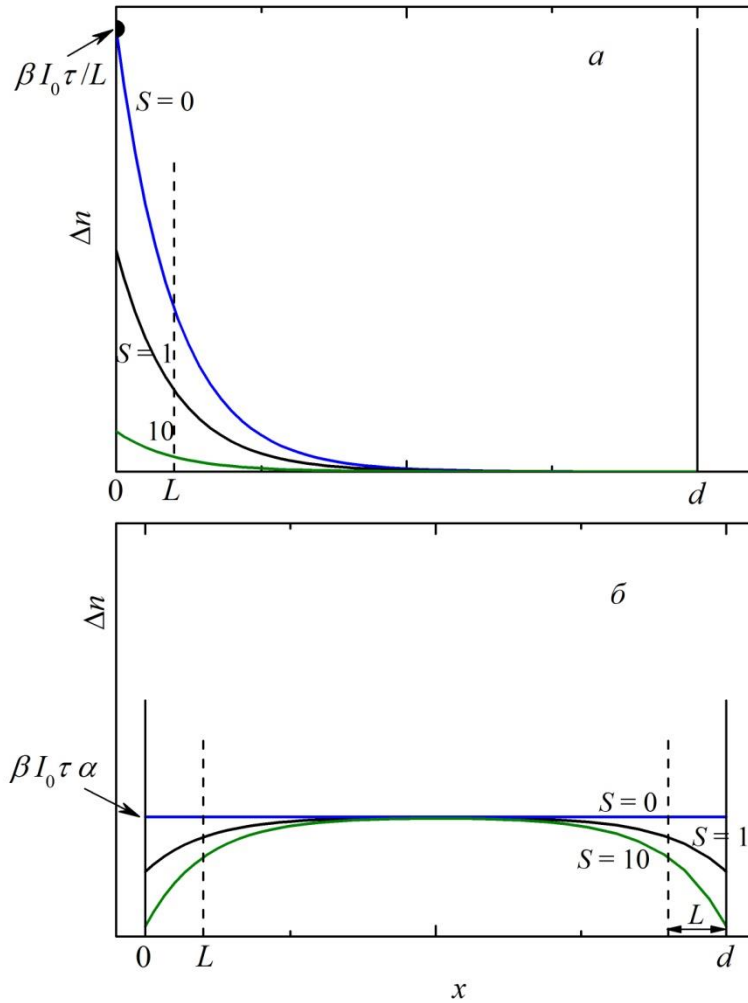


Рис. 4.2. Розподіл нерівноважних носіїв заряду по товщині зразка для випадків сильного (а) та слабого (б) поглинання збуджуючого світла.

Розглянемо протилежний випадок слабого поглинання світла, що реалізується при $1/\alpha \gg d$. Для такого світла частка інтенсивності, яка поглинається в зразку, мізерно мала, тому інтенсивність світлового пучка в межах всієї товщини зразка практично постійна, $I(x) = I_0 e^{-\alpha x} \approx I_0$ при $0 \leq x \leq d \ll 1/\alpha$. Це обумовлює однорідну генерацію нерівноважних носіїв по всій товщині зразка. При великій швидкості поверхневої рекомбінації ($S \gg 1$) спостерігатиметься інтенсивний витік нерівноважних носіїв заряду на поверхню, що стає помітним на глибині близько дифузійної довжини L (Рис. 4.2б). Зі зменшенням швидкості поверхневої рекомбінації не тільки збільшується концентрація нерівноважних носіїв по всій товщині зразка, але й

змінюється характер її розподілу. У граничному випадку $S \rightarrow 0$ нерівноважні носії заряду однорідно розподіляються в зразку.

Аналітичний розв'язок при $1/\alpha \gg d$ одержується із рівняння (4.6) заміною $I_0 e^{-\alpha x}$ на I_0 при накладанні граничних умов у вигляді (4.9) і (4.10):

$$\Delta n(x) = \beta \alpha I_0 \tau \left[1 - \frac{S \operatorname{ch}\left(\frac{x-d}{L} - \frac{d}{2L}\right)}{S \operatorname{ch}\frac{d}{2L} + \operatorname{sh}\frac{d}{2L}} \right]. \quad (4.14)$$

Обговоримо більш детально прояв приповерхневого шару (чи межі поділу, інтерфейсі, різних напівпровідників у гетероструктурі) у формуванні розподілу нерівноважних носіїв заряду по товщині зразка, зокрема правомірність використання граничних умов у вигляді (4.9) і (4.10).

Для простоти розгляду обмежимося випадком, коли процеси захоплення нерівноважних носіїв заряду на об'ємних центрах рекомбінації і прилипання несуттєві. У цьому випадку надлишкові концентрації електронів і дірок в об'ємі зразка рівні, $\Delta n = \Delta p$. Зрозуміло, що при цьому можна говорити про єдиний рекомбінаційний час життя нерівноважних електронів і дірок відносно часу об'ємної рекомбінації τ , а темп об'ємної рекомбінації характеризується величиною $\Delta n/\tau = \Delta p/\tau$. Зауважимо, що мова йде про рекомбінацію надлишкових над рівноважними носіїв заряду, тобто не береться до уваги та частина процесів рекомбінації, яка врівноважує теплову генерацію.

Поверхневі чи інтерфейсні стани, що захоплюють носії заряду з об'єму напівпровідника, призводять до вигину енергетичних зон біля поверхні, що проявляється на відстані порядку довжини екранування Дебая L_D (Рис. 4.3). Рівноважні концентрації електронів (n_{S0}) і дірок (p_{S0}) поблизу поверхні (інтерфейсу) визначаються величиною приповерхневого вигину зон $e\varphi_S$ і дорівнюють

$$n_{S0} = n_0 e^{e\varphi_S/kT}, \quad (4.15)$$

$$p_{S0} = p_0 e^{-e\varphi_S/kT}, \quad (4.16)$$

де n_0 і p_0 – рівноважні концентрації носіїв заряду в об'ємі напівпровідника.

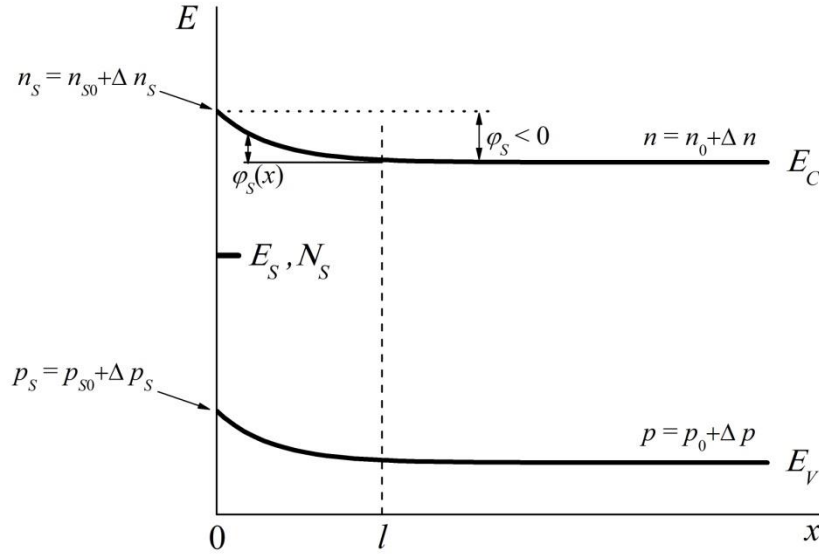


Рис. 4.3. Вигин зон біля поверхні напівпровідника чи межі поділу різних напівпровідників у гетероструктурі. Зображений на рисунку вигин зон відповідає негативному поверхневому (інтерфейсному) потенціалу $\varphi_S < 0$ (відповідно $e\varphi_S > 0$ для негативного заряду електрона e). За величину l можна прийняти відстань від поверхні при $x = 0$, для якої $\varphi(0) = \varphi_S \gg kT$, до площини $x = l$, для якої $\varphi(x) = kT$. При $x > l$ викривлення зон дуже мале.

Швидкості поверхневої (інтерфейсної) рекомбінації електронів s_n і дірок s_p в стаціонарних умовах можна виразити через темп поверхневої рекомбінації r_S і надлишкові концентрації Δn_S і Δp_S носіїв заряду на межі поділу:

$$r_S = s_n \Delta n_S = s_p \Delta p_S. \quad (4.17)$$

Оскільки темп поверхневої рекомбінації має розмірність потоку частинок, $[r_S] = \text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$, то, згідно з (4.17), розмірності s_n і s_p збігаються з розмірністю звичайної швидкості (см / с).

Однак, незважаючи на простоту співвідношень (4.17) і їх повну аналогію з співвідношеннями для темпу об'ємної рекомбінації, використання їх для розрахунку розподілу нерівноважних носіїв заряду в зразку виявляється незручним. Зокрема, при цьому граничні умови можна подати у вигляді (4.9) і (4.10). По-перше, тому, що завдяки поверхневому вигину зон $\Delta n_S \neq \Delta p_S$ навіть за однакової кількості об'ємних надлишкових концентрацій $\Delta n = \Delta p$. Як наслідок, неможливо ввести єдину швидкість поверхневої рекомбінації

електронів і дірок, оскільки $s_n \neq s_p$. По-друге, наявність градієнта електростатичного потенціалу всередині шару просторового заряду призводить до того, що потік надлишкових носіїв заряду до поверхні не матиме чисто дифузійного характеру, а значить, в граничні умови (4.9) і (4.10) необхідно додати дрейфові доданки.

Ці ускладнення можна обійти, припустивши, що носії заряду на межі поділу і в його об'ємі знаходяться в рівновазі один з одним, так що виконується умова:

$$n_s p_s \equiv (n_{s0} + \Delta n_s)(p_{s0} + \Delta p_s) = np \equiv (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p). \quad (4.18)$$

У цьому виразі через Δn і Δp позначено надлишкові концентрації електронів і дірок в об'ємі напівпровідника на межі з приповерхневою областю (в площині $x = l$).

Умова (4.18) свідчить, що квазірівні Фермі (F_n і F_p) є практично незмінними в межах приповерхневого шару, так що

$$F_p(0) - F_n(0) \approx F_p(l) - F_n(l). \quad (4.19)$$

При використанні умов (4.18) і (4.19) немає необхідності розв'язувати задачу про розподіл носіїв заряду в межах області об'ємного заряду, оскільки ці умови однозначно його визначають. Можна показати (див., наприклад, [4.2]), що закони розподілу надлишкових (нерівноважних) носіїв заряду в приповерхневої області мають той самий вигляд, що й для рівноважних:

$$\Delta n(x) = \Delta n e^{e\varphi_s/kT}, \quad (4.20)$$

$$\Delta p(x) = \Delta p e^{-e\varphi_s/kT}. \quad (4.21)$$

Розрахуємо темп поверхневої рекомбінації в стаціонарних умовах і покажемо, як, з урахуванням умов (4.18), можна визначити єдину для електронів і дірок швидкість поверхневої рекомбінації. Цей розрахунок загалом аналогічний моделі Шоклі і Ріда для об'ємних центрів.

Вважаємо, що на межі поділу є центри рекомбінації із концентрацією N_s та глибиною залягання E_s в забороненій зоні (Рис. 4.3). Швидкість захоплення електронів на ці рівні з урахуванням зворотнього теплового викиду можна записати у вигляді (див., наприклад, [4.2]):

$$r_{sn} = \alpha_n N_s [(1 - f_t)n_s - f_t n_t], \quad (4.22)$$

де α_n – усереднена по станах с-зони ймовірність захоплення електрона на рівні E_s , f_t – нерівноважна функція заповнення цього рівня,

$$n_t = N_C e^{(E_t - E_C)/kT}, \quad (4.23)$$

а N_C – густина станів у зоні провідності.

Аналогічно для дірок

$$r_{sp} = \alpha_p N_S [f_t p_s - (1 - f_t) p_t], \quad (4.24)$$

$$p_t = N_V e^{-(E_t - E_V)/kT}. \quad (4.25)$$

У стаціонарних умовах темп захоплення електронів і дірок на поверхневі рівні повинен бути однаковим, $r_{sn} = r_{sp}$ (це і є темп поверхневої рекомбінації, який ми позначили через r_s). З цієї рівності, враховуючи (4.22) і (4.24), знайдемо нерівноважну функцію заповнення рівнів E_s :

$$f_t = \frac{\alpha_n n_s + \alpha_p p_t}{\alpha_n (n_s + n_t) + \alpha_p (p_s + p_t)}. \quad (4.26)$$

Підставивши (4.26) у вирази (4.22) чи (4.24), одержимо:

$$r_s = \frac{N_S \alpha_n \alpha_p (n_s p_s - n_t p_t)}{\alpha_n (n_s + n_t) + \alpha_p (p_s + p_t)}. \quad (4.27)$$

Крім того, бачимо, що

$$n_t p_t = N_C N_V e^{-E_g/kT} = n_{s0} p_{s0}. \quad (4.28)$$

Скориставшись умовою (4.18), отримаємо:

$$\begin{aligned} n_s p_s - n_t p_t &= (n_{s0} + \Delta n_s)(p_{s0} + \Delta p_s) - n_{s0} p_{s0} = \\ &= (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_0 p_0 = (n_0 + p_0 + \Delta p) \Delta p, \end{aligned} \quad (4.29)$$

де враховано, що, за відсутністю процесів захоплення в об'ємі зразка, $\Delta n = \Delta p$.

Таким чином, вираз (4.27) можна подати у вигляді:

$$r_s = s \Delta p, \quad (4.30)$$

де введено єдину швидкість поверхневої рекомбінації електронів і дірок

$$s = \frac{N_S \alpha_n \alpha_p (n_0 + p_0 + \Delta p)}{\alpha_n (n_{s0} + \Delta n_s + n_t) + \alpha_p (p_{s0} + \Delta p_s + p_t)}. \quad (4.31)$$

Вирази (4.30) і (4.31) свідчать, що швидкість поверхневої рекомбінації s можна визначити як відношення темпу поверхневої рекомбінації до концентрації надлишкових носіїв заряду в об'ємі напівпровідника на межі з

приповерхневих шаром. Це дозволяє виключити з розгляду детальний опис процесів, що відбуваються власне в приповерхневому шарі. Іншою мовою, реальний процес рекомбінації через центри E_s замінюється процесом витікання пар надлишкових носіїв заряду скрізь уявну поверхню, що відокремлює приповерхневий шар просторового заряду від об'єму напівпровідника.

Розглянута модель поверхневої рекомбінації має певні межі застосовності, обумовлені припущенням (4.18). Для цього потрібно, щоб, по-перше, довжина дифузії $L = \sqrt{D\tau}$ істотно перевищувала довжину екранування $L_D = \sqrt{\epsilon kT / ne^2}$. По-друге, довжина дрейфу в шарі просторового заряду не повинна перевищувати дифузійної довжини. Більш детальний аналіз цих обмежень можна знайти в літературі [4.2].

4.2. Поверхнева фото-е.р.с. у структурі із квантовими ямами

Як зазначено у п. 2, біля поверхні (чи межі поділу) напівпровідника існує область просторового заряду із відповідним вигином енергетичних зон біля поверхні (межі поділу). На енергетичній діаграмі це зображується (Рис. 4.4а). Таким чином, між поверхнею та об'ємом напівпровідника існує різниця потенціалів V_s . При освітленні поверхні напівпровідника світлом з енергією квантів $h\nu$, що перевищує ширину забороненої зони, в приповерхневому шарі будуть народжуватись електронно-діркові пари (темні й світлі кружечки на 4.4б), які будуть просторово розділяться електричним полем в області просторового заряду (стрілки 1 і 2 на Рис. 4.4б). При цьому різниця потенціалів між поверхнею та об'ємом зміниться до величини V_{s1} . Індукована освітленням зміна різниці потенціалів $\Delta V = V_{s1} - V_s$ називається *поверхневою фото-е.р.с.*

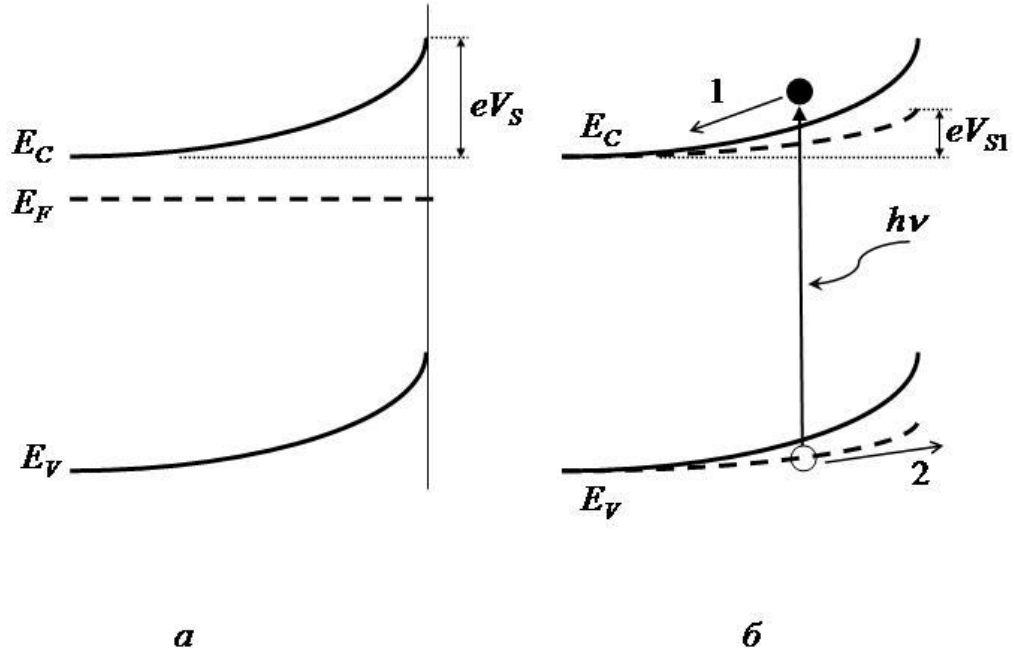


Рис. 4.4. Виникнення поверхневої фото-е.р.с.

Для більш детального опису розглянемо структуру, схематично зображену на Рис. 4.5, що складається з ізолюваної квантової ями, розміщеної в шарі напівпровідника n -типу із малою концентрацією носіїв заряду (тобто у шарі просторого заряду товщиною l на Рис. 4.3). Квантова яма розташована на відстані a від поверхні структури. Припустимо, що рівноважний поверхневий потенціал ϕ_0 та рівноважна концентрація електронів n_0 задовольняють умову

$$e\phi(a) \equiv \left(\sqrt{e\phi_0} - \sqrt{\frac{2\pi e^2 n_0 a^2}{\epsilon}} \right)^2 > \Delta E_C - E_{n1}, \quad (4.32)$$

де $\phi(a)$ – рівноважний потенціал в площині квантової ями, n_0 – концентрація електронів в об'ємі напівпровідника, ΔE_C – розрив зони провідності на гетеропереході, а E_{n1} – енергія першого квантового рівня електронів у квантовій ямі. Умова (4.32) відповідає ситуації, коли квантова яма не містить рівноважних носіїв заряду.

Опис залежить від співвідношення між шириною забороненої зони E_{g1} бар'єрного напівпровідника та енергією фотона $\hbar\omega$. Почнемо з випадку $E_{g2} <$

$\hbar\omega < E_{g1}$, коли фотогенеровані електронно-діркові пари утворюються тільки всередині квантової ями і відмінності від об'ємного напівпровідника найяскравіші.

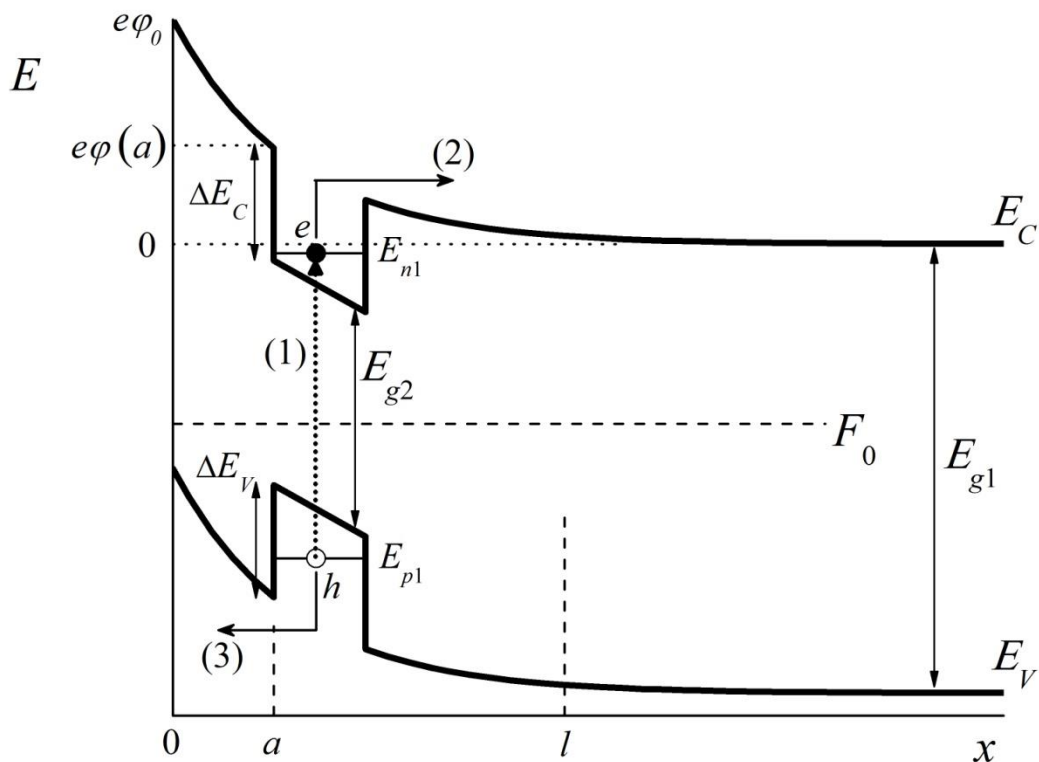


Рис. 4.5. Схематична діаграма структури з квантової ями у приповерхневому шарі просторого заряду.

Розглянемо міжзонну генерацію нерівноважних електронів і дірок із концентраціями Δn і Δp при оптичному поглинанні за умови $E_{g2} < \hbar\omega < E_{g1}$ (стрілка (1) на Рис. 4.5), коли електронно-діркові пари (e - h пари на Рис. 4.5) утворюються виключно всередині квантової ями. Як відомо з курсу фізики напівпровідників, у нерівноважному випадку замість одного рівня Фермі F_0 можна ввести окреми рівні Фермі для електронів F_n та дірок F_p . При цьому виникає фотое.р.с., яку можна подати у вигляді суми двох компонент, $\Delta V = V_n + V_p$. Електронна компонента V_n формується в області $x > a$ завдяки звільненню електронів з квантової ями та їх руху в нейтральну об'ємну частину структури, що зображено стрілкою (2) на Рис. 4.5. Навпаки, діркова компонента фотое.р.с. формується в області $0 < x < a$ при звільненні дірок з квантової ями

та їх руху в приповерхневий шар структури (при $x \approx 0$), як зображено стрілкою (3) на Рис. 4.5. В разі, якщо генерація й рекомбінація носіїв заряду відбувається переважно в квантовій ямі і не виникають макроскопічні струми, рівні F_n та F_p залишаються незмінними уздовж структури. Їх значення, відраховані від дна зони провідності (прийнятого за нуль відліку енергії – Рис. 4.5) безпосередньо пов'язані із значеннями Δn і Δp . Використовуючи вирази для концентрації вільних носіїв заряду, отримані в курсі фізики напівпровідників, запишемо:

$$\Delta n = \frac{N_C^{(2)}}{N_C^{(3)}} n_0 \exp\left(-\frac{e\varphi(a) + \Delta E_C - E_{n1}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{F_n - F_0 + eV_n}{kT}\right) - 1\right], \quad (4.33)$$

$$\Delta p = \frac{N_V^{(2)} N_C^{(3)}}{n_0} \exp\left(\frac{-E_{g1} + e\varphi(a) + \Delta E_V - E_{p1}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{F_0 - F_p - eV_n}{kT}\right) - 1\right]. \quad (4.34)$$

У цих виразах $N_C^{(2)}$ – двовимірна густина станів у квантовій ямі, $N_C^{(3)}$ – густина станів в об'ємному напівпровіднику (за межами квантової ями). Знов, користуючись виразом з курсу фізики напівпровідників, запишемо $F_0 = kT \ln(n_0/N_C^{(3)})$.

Рівняння (4.33) і (4.34) вміщують невідомі параметри F_n та F_p . Оскільки в області бар'єрного напівпровідника, ззовні від квантової ями, фотогенерація відсутня, положення F_n фіксується донорним рівнем в об'ємі напівпровідника, тому

$$F_n = F_0 \quad (4.35)$$

і для заданого Δn рівняння (4.33) визначає F_n .

Розв'язок для дірок складніший і залежить від накладених на поверхні умов. Припустимо спочатку, що густина поверхневих станів N_S достатньо висока, так що F_p фіксується на поверхні. У випадку великого вигину зон $e\varphi_0$, що й сприяє виникненню фотое.р.с., таке припущення здається цілком виправданим. При освітленні деяка кількість дірок звільняється з квантової ями, мігрує до поверхні (стрілка (3) на Рис. 4.5), захоплюється на поверхневі стани й змінює заряд поверхні на $\Delta\sigma$. В рамках простої моделі плоского конденсатора фотое.р.с., що генерується надлишковою концентрацією носіїв Δn , просторово

рознесених на відстань d , дорівнює $\Delta V = (e\Delta n/\varepsilon\varepsilon_0)d$ (ε_0 – електрична стала).

Тоді V_p компонента фотое.р.с. є

$$V_p = \frac{\Delta\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0} a. \quad (4.36)$$

З іншого боку, $\Delta\sigma$ пропорційна зсуву квазірівня Фермі F_p відносно положення поверхневих станів, $\Delta\sigma = eN_S(F_0 - F_p - eV_n - eV_p)$. Підставивши $\Delta\sigma$ у (4.36) та розв'язавши отримане рівняння відносно V_p , одержимо:

$$V_p = \frac{eN_S a(F_0 - F_p - eV_n)}{e^2 N_S a + \varepsilon\varepsilon_0}. \quad (4.37)$$

Якщо покласти $N_S \approx 5 \times 10^{12} \text{ см}^{-2} \text{ еВ}^{-1}$ (типове значення для GaAs без пасивації поверхні), то для $a \geq 20 \text{ нм}$ другий доданок в знаменнику виразу (4.37) домінує і $eV_p \approx F_0 - F_p$. При менших N_S чи a величина V_p зменшиться завдяки зсуву F_p відносно положення поверхневих станів.

Вирази (4.33)- (4.37) задають фотое.р.с. $\Delta V = V_n + V_p$ як функцію Δn і Δp і залишається виразити надлишкові концентрації через вимірюваний параметр – інтенсивність світла I , що залежить від характеру генераційно-рекомбінаційних процесів у квантовій ямі. Якщо оптичне поглинання характеризується коефіцієнтом поглинання $\alpha^{(2)}(\omega)$, де показник (2) позначає двовимірний характер поглинаючої системи, то коефіцієнт оптичної генерації $g = \alpha^{(2)}(\omega)I$. Зазначимо, що у двовимірній системі $\alpha^{(2)}(\omega) < 1$ – безрозмірний параметр, що позначає долю інтенсивності падаючого світла, що поглинається шаром квантової ями.

Для часів життя електронів τ_n і дірок τ_p маємо $\Delta n = \alpha^{(2)}(\omega)I\tau_n$ та $\Delta p = \alpha^{(2)}(\omega)I\tau_p$. Тоді

$$\begin{aligned} \Delta V = & \frac{kT}{e} \ln \left[1 + \frac{\alpha^{(2)}(\omega)I\tau_n N_C^{(3)}}{N_C^{(2)} n_0} \exp \left(\frac{e\varphi(a) - \Delta E_C + E_{n1}}{kT} \right) \right] + \\ & + \frac{eN_S a kT}{e^2 N_S a + \varepsilon\varepsilon_0} \ln \left[1 + \frac{\alpha^{(2)}(\omega)I\tau_p n_0}{N_V^{(2)} N_C^{(3)}} \exp \left(\frac{E_{g1} - e\varphi(a) - \Delta E_V + E_{p1}}{kT} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Для малої інтенсивності, коли залежність фотое.р.с. ΔV від інтенсивності є лінійною, її температурна залежність експоненціальна, а залежність від $\varphi(a)$

має мінімум при $e\varphi(a) = F_0 + (E_{g1} + \Delta E_C - \Delta E_V - E_{n1} + E_{p1})/2$, тобто коли рівень Фермі лежить посередині між найнижчими електронним (E_{n1}) та дірковим (E_{p1}) рівнями у квантовій ямі. Цей результат протирічить інтуїтивному відчуттю, що великий вигин зон $e\varphi_0$ є сприятливим для спостереження фотое.р.с. Зазначимо, однак, що цей висновок справедливий лише для слабкого освітлення, коли залежність $\Delta V(I)$ є лінійною. Для менших значень $e\varphi_0$ інтервал інтенсивностей I , що забезпечує таку лінійність, стає вузьким і значення насичення ΔV , яке залежить від $e\varphi_0$, зменшується. Крім того, наведені розрахунки передбачають, що $e\varphi(a) > \Delta E_C - E_{n1}$, і стають некоректними при дуже малому $e\varphi_0$.

Для кількісних оцінок візьмемо типові значення для квантових ям у напівпровідниках A_3B_5 : $\alpha^{(2)} \sim 1/30$, $\tau_n \sim 10^{-8}$ с, $N_C^{(3)} \sim 10^{17}$ см⁻³, $N_C^{(2)} \sim 10^{11}$ см⁻², $n_0 \sim 10^{15}$ см⁻³ і $e\varphi(a) - \Delta E_C + E_{n1} \sim 0,3$ еВ. При кімнатній температурі другий доданок під логарифмом у виразі (4.38) стає порядку одиниці і тому ΔV сягає декілька десятків мВ при інтенсивності світла $I \sim 10^{14}$ см⁻² с⁻¹.

У випадку об'ємної генерації ($\hbar\omega > E_{g1}$) властивості фотое.р.с. ближчі до тих, що спостерігаються у звичайному об'ємному напівпровіднику. Однак, на відміну від об'ємного випадку, коли електрони зосереджені за межами області просторового заряду (при $x > l$ на Рис. 4.5), а дірки – біля поверхні, у структурі з квантовою ямою значна кількість нерівноважних носіїв заряду локалізується в ній. Завдяки цьому значна доля рекомбінаційних процесів відбувається в квантовій ямі, створюючи певний інтерфейсний заряд при $x = a$, впливаючи на розподіл потенціалу.

При досягненні рівноважних умов в системі електронів і дірок вираз (4.38) для фотое.р.с. залишається справедливим за умови заміни $\alpha^{(2)}(\omega)I < I$ (що відповідає темпу генерації в квантовій ямі) на $\int \alpha^{(3)}(\omega)I \times \exp[\alpha^{(3)}(\omega)x]dx = I$. Порівнюючи ці два вирази можна зробити висновок, що збільшення енергії кванта вище за E_{g1} ($\hbar\omega > E_{g1}$) призводить до різкого зростання фотое.р.с. із наступним насиченням при залежному від ω значенням.

4.3. Дослідження оптичних переходів носіїв заряду в квантових ямах методом конденсаторної фото-е.р.с.

Поверхневу фото-е.р.с. можна зареєструвати безконтактним конденсаторним методом – Рис. 4.6. Світло від світлодіода проходить крізь прозору кварцеву пластину 1 і потрапляє на напівпрозорий металевий електрод 2, відокремлений від зразка 3 та, тонкою ізолюючою пластинкою 4 зі слюди, що утворює плоскопаралельний конденсатор. На верхній грані зразка нанесений заземлений металевий електрод 5.

Реалізуючи модульоване освітлення напівпровідника, з металевого електрода за допомогою високоомного резистора 6 можна зняти змінне падіння напруги, амплітуда якої ΔV визначається величиною поверхневої фото-е.р.с.

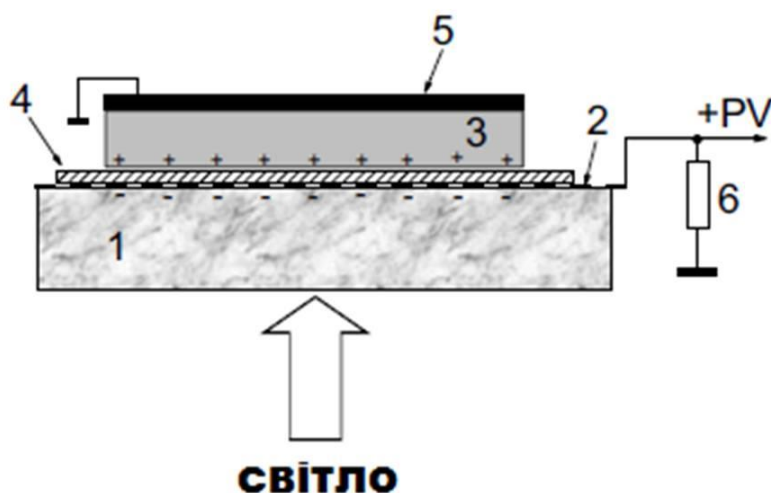


Рис. 4.6. Схема вимірювання поверхневої фото-е.р.с. 1 – прозора кварцева пластинка, 2 – металевий електрод, 3 – зразок, 4 – ізолюючий шар кварцу, 5 – заземлений металевий електрод, 6 – вихідний опір.

При оптичному збудженні лише при певних енергіях квантів світла $\hbar\omega_{e-h}$ будуть спостерігатися оптичні переходи електронів в квантових ямах між

дискретними енергетичними рівнями в валентній зоні та зоні провідності (Рис. 4.7).

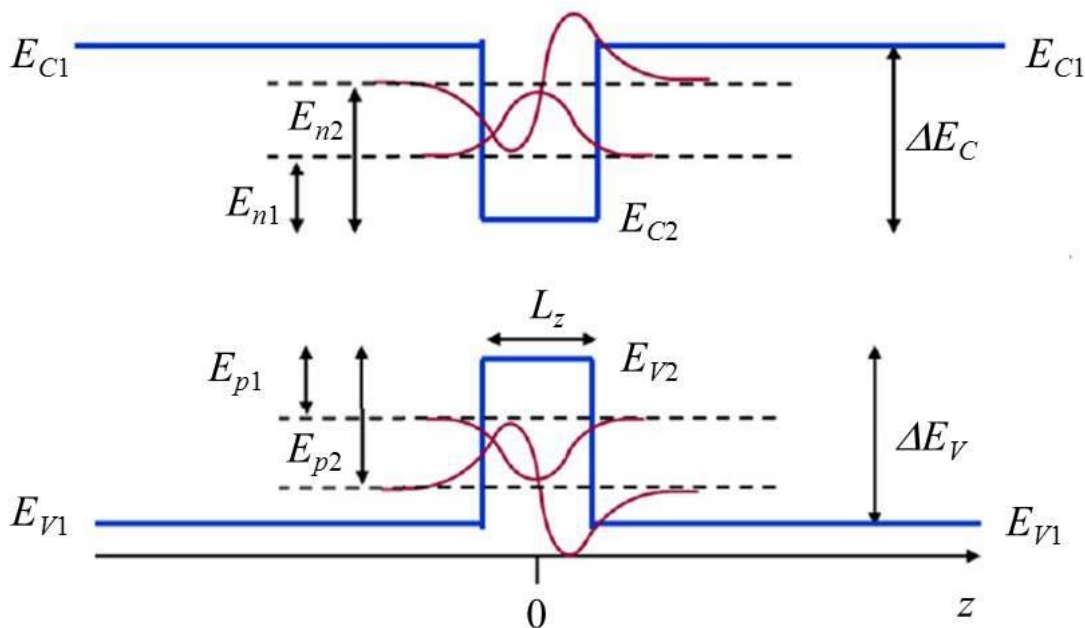


Рис. 4.7. Дискретні енергетичні рівні (пунктир) в зоні провідності (e_1 , e_2) та валентній зоні (h_1 , h_2). Суцільні лінії показують ψ -функції електронів і дірок.

Для напівпровідникових структур можна розрахувати положення енергетичних рівнів носіїв заряду в квантових ямах, та відповідні дозволені оптичні переходи. Актуальним є питання про експериментальне вимірювання дозволених оптичних переходів в квантових ямах (див. п. 3.3.1). Як правило, квантові ями в реальних напівпровідникових структурах знаходяться в межах приповерхневої області просторового заряду і в них спостерігається вигин зон, аналогічний зображеному на Рис. 4.5. При оптичному збудженні квантами світла, енергія яких відповідає дозволеним оптичним переходам, в квантовій ямі будуть народжуватись електрони і дірки, які просторово розділяються, як описано в п. 4.2. Як наслідок, виникає фотое.р.с. ΔV , залежна від довжини хвилі

світла (спектр фотое.р.с.). На певних довжинах хвиль, що відповідають дозволеним оптичним переходам в квантовій ямі, спостерігається зростання ΔV . Типовий спектр конденсаторної фотое.р.с. в напівпровідниковій квантовій ямі подано на Рис. 4.8.

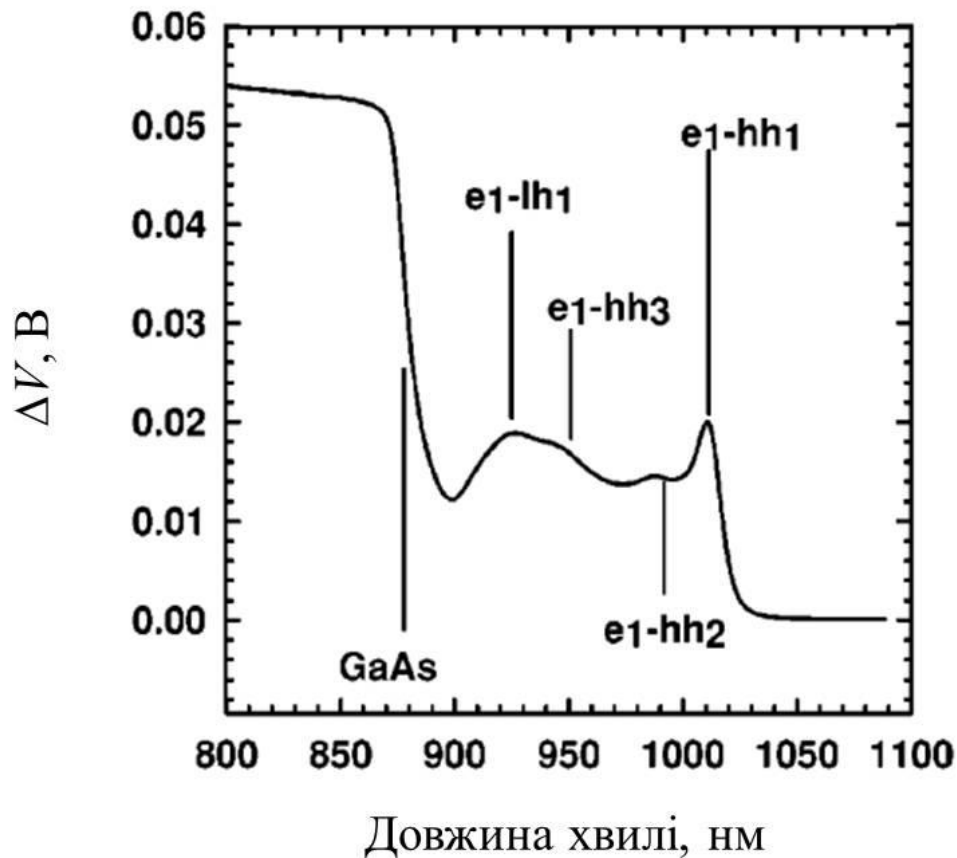


Рис. 4.8. Типовий спектр поверхневої фото-е.р.с. в квантовій ямі GaAs/In_{0,2}Ga_{0,8}As/GaAs із позначеними піками для дозволених оптичних переходів в межах квантової ями: e1 – найнижчий електронний стан (E_{n1} на Рис. 4.5 і 4.7), h1-h3 – три найнижчі діркові стани для легких (lh) та важких (hh) дірок.

ВИКОРИСТАНА ЛІТЕРАТУРА

До розділів 1 і 2

- [1.1] Воробьев Л. Е. Оптические явления в полупроводниковых квантово-размерных структурах / Л. Е. Воробьев, Л. Е. Голуб, С. Н. Данилов, Л. Е. Ивченко, Д. А. Фирсов, В. А. Шалыгин. – Санкт-Петербург, 2000 – 156 с.
- [1.2] Драгунов В. П. Основы нанoeлектроники / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004 – 496 с.
- [1.3] Бонч-Бруевич В. Л. Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. И. Калашников. – М.: Наука, 1990 – 672 с.
- [1.4] Davies J. H. The physics of low-dimensional semiconductors. / J. H. Davies. – New York: Cambridge University Press, 1998 – 439 p.
- [1.5] Sattler K. D. Nanoparticles and Quantum Dots / K. D. Sattler. – Boca Raton: CRC Press, 2011 – 439 p.

До розділу 3

- [3.1] S.L.Chuang. Physics of Photonic Devices, 2nd ed.-New York: Wiley, 2009-821p.
- [3.2] G. Bastard. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures.- Les Ulis: Les Editions de Physique, 1988 – 358 p.
- [3.3] Singh J. Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures - New York: Cambridge University Press, 2003 – 532 p.
- [3.4] Livescu G.; Miller D.A.B.; Chemla D.S.; Ramaswamy M.; Chang T.Y.; Sauer N.; Gossard A.C.; English J.H. Free carrier and many-body effects in absorption spectra of modulation-doped quantum wells// IEEE Journal of Quantum Electronics- 1988- V.24, N.8.- p.1677-1689.
- [3.5] Воробьев Л. Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгин В.А. Оптические свойства наноструктур. – СПб: Наука 2001 – 188 с.

До розділу 4

- [4.1] Рывкин С. М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. М.: Физматгиз, 1963.

- [4.2] Ржанов А. В. Электронные процессы на поверхности полупроводников. М.: Наука, 1971.
- [4.3] Ruda H., Shik A. Surface photovoltage in quantum well structures // J. Appl. Phys. – 2002. – V. 91, N 10. – p. 6476-6480.
- [4.4] Datta S., Arora B. M., Kumar S. Bound exciton effect and carrier escape mechanisms in temperature-dependent surface photovoltage spectroscopy of a single quantum well // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 62, N 20. – p. 13604-13611.