

## §1. Поглинання світла в напівпровідниках.

У попередніх темах ми неодноразово якоюсь мірою торкались питань, пов'язаних із взаємодією напівпровідника з електромагнітним випромінюванням. Тепер розглянемо це питання більше систематизовано й докладно. Взагалі кажучи, взаємодія випромінювання з твердим тілом, а особливо з напівпровідниками, несе, якщо можливо так висловитись, глибоке фізичне «навантаження». По-перше, при цьому спостерігається велика кількість практично важливих явищ, по друге, оптичні вимірювання дають можливість визначити значну кількість електрофізичних параметрів напівпровідників. «Чому переважно напівпровідників»?

Добре відомо, що при проходженні випромінювання через речовину його інтенсивність зменшується, по-перше, внаслідок відбиття на межі розподілу (на поверхні) і, по-друге, через поглинання в об'ємі. Розглянемо процеси поглинання (без врахування відбиття).

Внаслідок поглинання світла шаром речовини товщиною  $dx$  інтенсивність випромінювання зменшиться на величину  $dI$ . Ця інтенсивність поглинання світла, очевидно, пропорційна інтенсивності світла що падає  $I$  й товщині поглинаючого шару  $dx$ :

$$-dI = \alpha I dx \quad (1)$$

Коефіцієнт пропорційності  $\alpha$ , що дорівнює кількості поглиненої енергії з потоку одиничної інтенсивності в шарі одиничної товщини, називають коефіцієнтом поглинання. Рішення (1) дає вираз:

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x} \quad (2)$$

який є відомим законом Буггера-Ламберта ( $I_0$  – початкова, вихідна інтенсивність).

Виходячи з експоненційного вигляду закону ослаблення світла (2), можна інтерпретувати величину  $\alpha$  як імовірність поглинання фотона на одиниці товщини зразка, а величину  $\alpha^{-1} = \ell_\phi = \frac{1}{\alpha}$  зворотну  $\alpha$  як середню довжину вільного пробігу фотона (відстань, на якому  $I$  зменшується в  $e$  раз).

Якщо є  $N$  поглинаючих центрів й імовірність поглинання одного фотона одним поглинаючим центром в одну секунду дорівнює  $\sigma$ , то

$$\alpha = \sigma N \text{ і } \ell_\phi = (\sigma N)^{-1}.$$

Якщо врахувати відбиття випромінювання на межі розподілу шляхом введення коефіцієнта відбиття  $R(\lambda) = \frac{I_R}{I_0}$  ( $I_R$  - інтенсивність відбитого випромінювання), закон Буггера-Ламберта буде мати вигляд  $I(x) = I_0(1 - R)e^{-\alpha x}$ .

Зазвичай, при вивчені поглинання основним завданням є виявлення залежності  $\alpha(\lambda)$  або  $\alpha(h\nu)$ , яка називається *спектром поглинання*. ( $R(\lambda)$  - спектр відбиття).

Відповідно до особливостей зонної структури твердого тіла (типу кристалічної решітки, наявності дефектів) в напівпровідниках розрізняють кілька основних механізмів поглинання:

- 1) *власне або фундаментальне поглинання*, пов'язане з електронними переходами між дозволеними зонами енергії;
- 2) *поглинання вільними носіями заряду (внутрішньозонне)* пов'язане з електронними (або дірковими) переходами в межах відповідних дозволених зон або між підзонами дозволених зон;
- 3) *домішкове поглинання*, пов'язане з електронними (або дірковими) переходами між дозволеними зонами та домішковими рівнями у забороненій зоні;
- 4) *міждомішкове поглинання*, пов'язане з електронними (або дірковими) переходами між домішковими станами у забороненій зоні;
- 5) *екситонне поглинання*, пов'язане із утворенням (генерацією) або розпадом екситонних станів;
- 6) *фононне (граткове, решіткове) поглинання*, пов'язане з поглинанням енергії електромагнітної хвилі коливаннями атомів кристалічної гратки та народженням при цьому у гратці нових фононів (типів нормальних мод);
- 7) *плазмове (плазмонне) поглинання*, пов'язане з поглинанням енергії електромагнітної хвилі електронно-дірковою плазмою і переходом плазми в більш високі квантовані стани.
- 8) *поглинання окремим електроном* (комптонівське розсіювання).

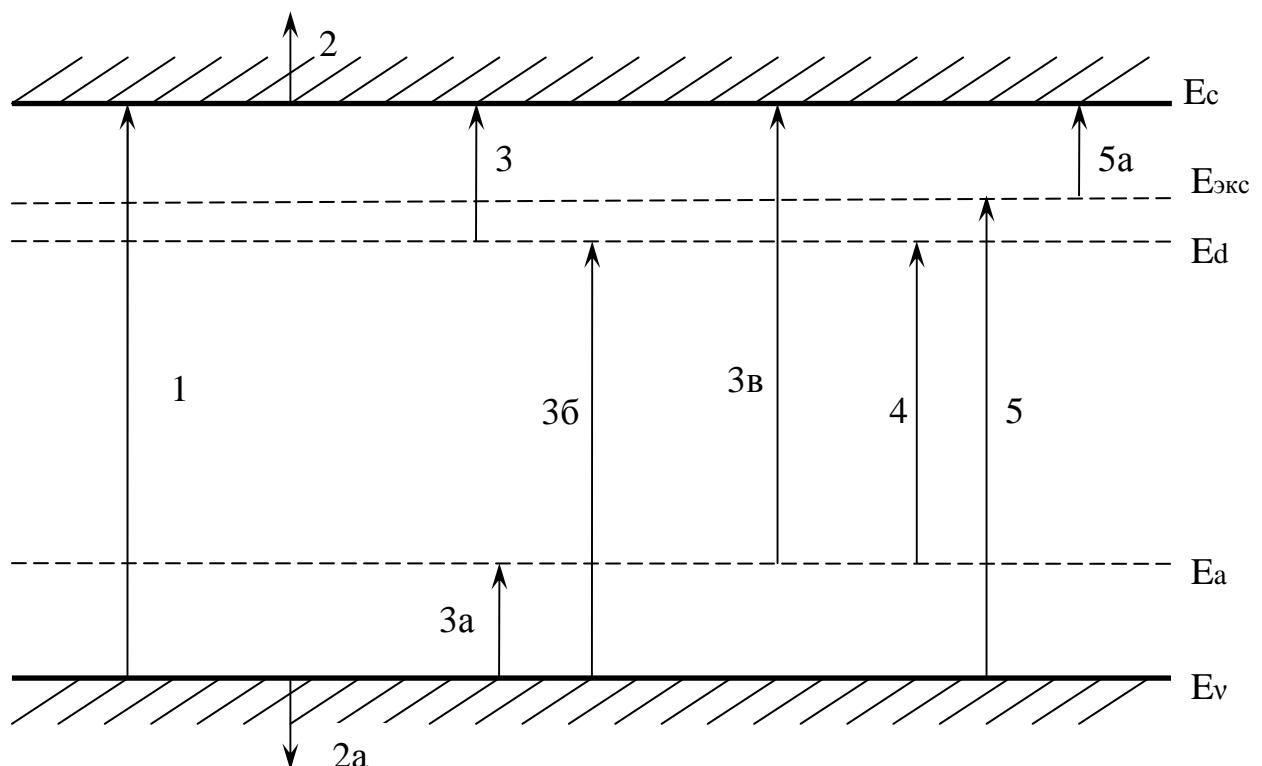


Рис.9.1. Схема електронних переходів при поглинанні:

1 - власне поглинання; 2,2a - поглинання вільними носіями; 3,3a - домішкове поглинання (домішка – близня зона); 3б,3в - домішкове поглинання (домішка – дальня зона); 4 - міждомішкове поглинання; 5 - екситонне поглинання (збудження екситона); 5a - екситонне поглинання (розділ екситона).

Очевидно, що при поглинанні випромінювання повинні виконуватись два фундаментальні закони збереження – енергії та імпульсу (квазіімпульсу):

$$E + \hbar\omega = E'$$

$$\vec{p} + \hbar\vec{\eta}_\phi = \vec{p}'$$

або

$$\hbar\vec{k} + \hbar\vec{\eta}_\phi = \hbar\vec{k}'$$

Якщо енергія фотона витрачається на переведення електрона з валентної зони в зону провідності, то поглинання є власним або фундаментальним.

Характер власного поглинання визначається насамперед особливостями зонної структури напівпровідника. (Прямі та непрямі зони, прямоzonні та непрямоzonні напівпровідники)?

Для простої зонної структури, коли зона провідності й валентна зона близькі до параболічних й екстремуми їх лежать при  $k=0$  (або при однаковому  $k$ ), так що ізоенергетичні поверхні є сфери із центром при  $k=0$ , переходи електронів через заборонену зону будуть відбуватися, насамперед, між енергетичними станами, що відповідають максимуму валентної зони й мінімуму зони провідності, тобто при значеннях квазіімпульсу  $\vec{p}$  або хвильового вектора  $\vec{k}$ , близьких до 0.

Такі переходи, коли  $\vec{k}$  залишається незмінним, називають прямими, або вертикальними. Тобто для вертикальних переходів:

$$\begin{aligned}\vec{p}' &\approx \vec{p} \\ \vec{k}' &\approx \vec{k}\end{aligned}$$

( $\vec{p}$  і  $\vec{k}$  - квазіімпульс та хвильовий вектор електрона до взаємодії,  $\vec{p}'$  і  $\vec{k}'$  - після взаємодії).

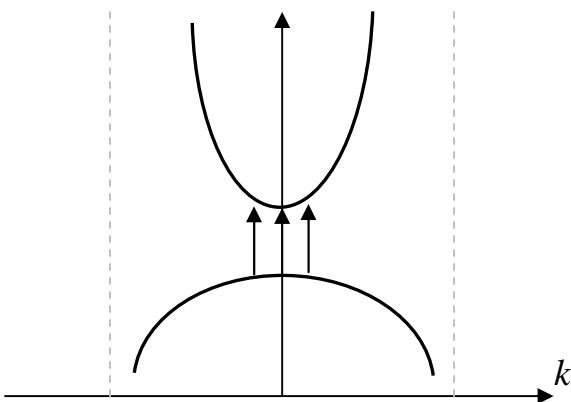


Схема вертикальних переходів.

Насправді оптичні прямі переходи не зовсім «вертикальні», бо фотон що поглинається, передає електрону й свій імпульс  $\frac{h\nu}{c} = \hbar\eta = \frac{h}{\lambda_\phi}$ . Але оскільки

$\lambda_\phi = 10^{-1} \div 10^{-5}$  см, то цей імпульс малий у порівнянні з імпульсом електрона (в електрона при 300 К  $\lambda \approx 5 \cdot 10^{-7}$  см), та переходи можна вважати майже вертикальними.

Прямі переходи (як, до речі, й непрямі) можуть бути «дозволеними» й «забороненими». Дозволені переходи – це переходи для яких виконується правило відбору:  $\Delta\ell = 0 \pm 1$  (тобто коли валентна зона утворена із  $s$ -станів ізольованого атома, а зона провідності – із  $s$ - або  $p$ -станів). Якщо правила відбору не виконуються, то такі переходи заборонені (наприклад, валентна зона утворена із  $s$ -станів, а зона провідності з  $d$ -станів).

Для прямих дозволених переходів на краю фундаментального поглинання теорія дає:

$$\alpha = A(hv - \Delta E_g)^{1/2}$$

Для прямих заборонених на краю фундаментального поглинання:

$$\alpha = A'(hv - \Delta E_g)^{3/2}$$

У напівпровідниках з складними непрямими зонами (**Ge**, **Si**), власне поглинання ускладнюється.

Тут спостерігаються як прямі так і непрямі переходи. Оскільки при непрямих переходах  $\vec{p}$  (або  $\vec{k}$ ) змінюється значно, такі переходи здійснюються тільки за участю третьої частки – фонона, що забезпечує закони збереження енергії й імпульсу.

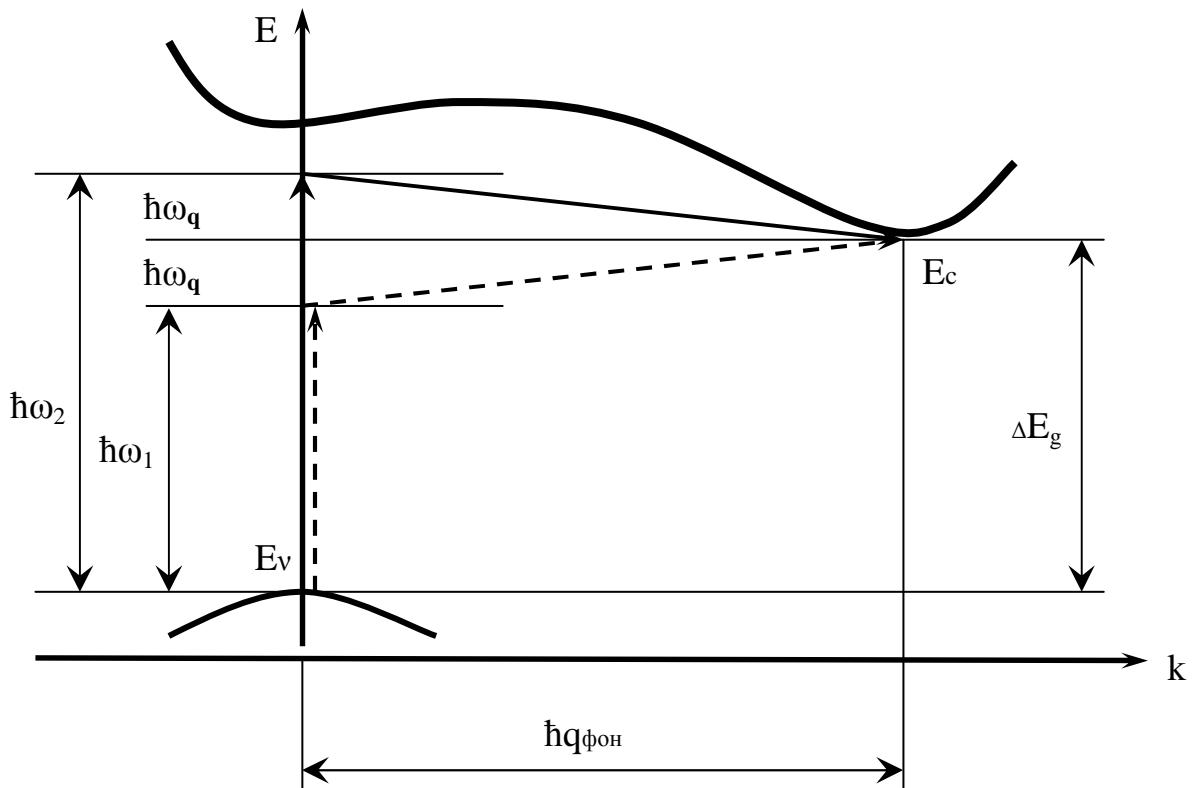


Рис.9.2. Процес поглинання при непрямих переходах через проміжні віртуальні стани. Пунктиром позначений переход із поглинанням фонона, суцільними стрілками – переход із випромінюванням фонона.

Для непрямих дозволених переходів при поглинанні фонона:

$$\alpha_a(h\nu) = \frac{A_1(h\nu - E_g + E_p)^2}{e^{\frac{E_p}{k_0T}} - 1} \sim f_p$$

При випромінюванні фонона

$$\alpha_e(h\nu) = \frac{A_2(h\nu - E_g - E_p)^2}{1 - e^{-\frac{E_p}{k_0T}}} \sim 1 + f_p$$

$$\alpha = \alpha_a + \alpha_e$$

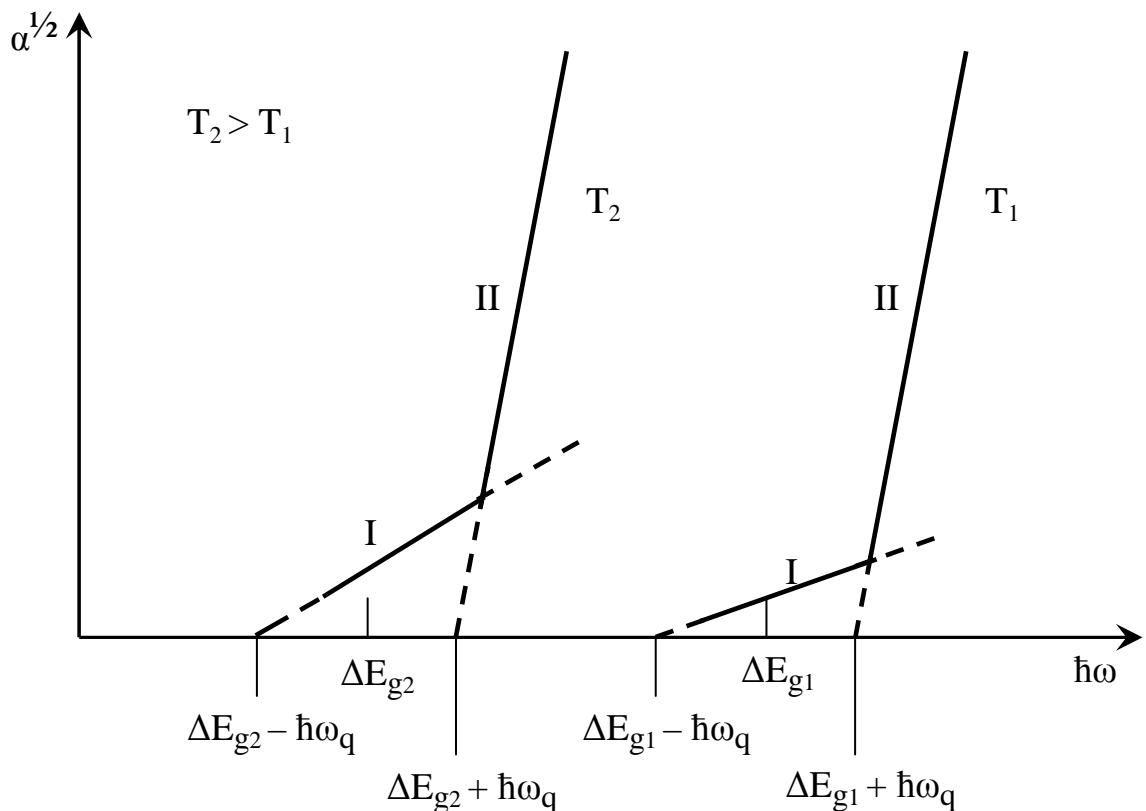


Рис.9.3. Визначення «оптичної» ширини забороненої зони та енергії фононів, що приймають участь у поглинанні, по краю власного поглинання для непрямих переходів.

Якщо непрямі переходи заборонені, то показник степеня в чисельниках для  $\alpha$  збільшується на одиницю:

$$\alpha_a(h\nu) = \frac{A_1(h\nu - E_g + E_p)^3}{e^{\frac{E_p}{k_0T}} - 1}$$

$$\alpha_e(h\nu) = \frac{A_2(h\nu - E_g - E_p)^3}{1 - e^{-\frac{E_p}{k_0T}}}$$

При поглинанні вільними носіями заряду спрощена теорія дає

$$\alpha = \frac{\sigma}{n c \epsilon_0} = \frac{q^2 \langle \tau \rangle}{n c \epsilon_0 m^*} \cdot n.$$

Оскільки спектр станів у дозволених зонах квазібезперервний, структурних особливостей у спектрі поглинання, як правило, не спостерігається.

Екситон називають збуджений стан електронної системи кристала, що складається з електрона і дірки, які зв'язані між собою й спільно переміщуються по кристалу (електрон не закріплюється на якомусь локальному рівні). Енергія экситона у воднеподібному наближенні

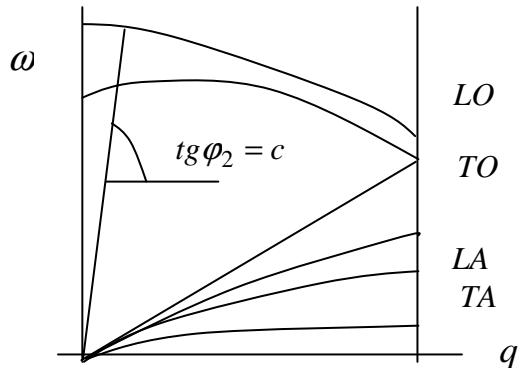
$$\Delta E_{exc} = \frac{q^4 m_{np}^*}{8 h^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2} \cdot \frac{1}{n^2},$$

тому енергії фотонів, що поглинаються, повинні задовольняти умові

$$h\nu = \Delta E_g - \frac{q^4 m_{np}^*}{8 h^2 \epsilon_0^2 \epsilon^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

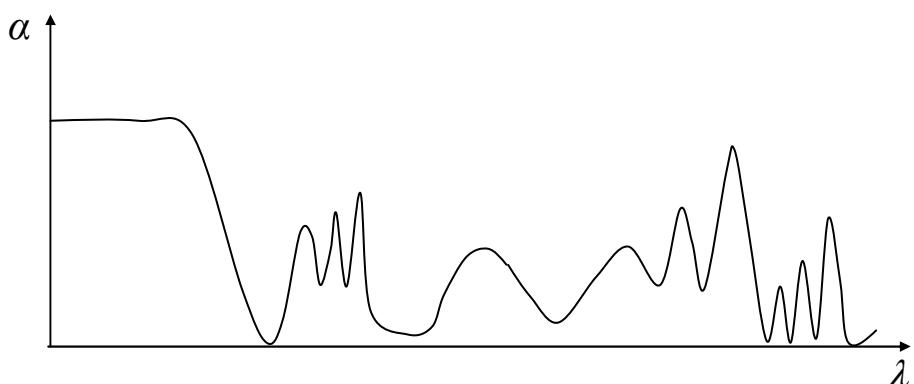
Коефіцієнт экситонного поглинання для різних типів переходів пов'язаний з цими величинами.

При решітковому однофононному поглинанні можуть виникати тільки поперечні оптичні фонони. Оптичні тому, що при поглинанні повинен виконуватись закон збереження енергії, поперечні тому, що світлова хвиля - це поперечні електромагнітні коливання.



Закони дисперсії для фононів та фотонів

Спектр домішкового поглинання має вигляд вузьких дискретних піків.



Схематичний вигляд загального (в усьому діапазоні λ) спектру поглинання.