

УДК 538.91

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

В. Н. Ивахно

Наряду с чисто энергетической зависимостью квантовых переходов, определяемой перекрытием волновых функций, в полупроводниковых кристаллах имеется и пространственно-временная, определяемая пространственно-временным распределением валентных электронов. Это в корне меняет динамику квантовых процессов: поглощение фотонов, умножение электронов, электрический пробой. Анализ ведется в атомном масштабе.

Ключевые слова: квантовые переходы, элементарные ячейки кристаллов, интенсивность.

Для полупроводников Ge, Si – непрямозонных в \vec{k} -пространстве, а также для прямозонных InSb, InAs, GaSb, GaAs, PbS, CdHgTe автором было обнаружено активное участие $\approx 10\%$ непрямых переходов в оптических и электронных процессах [1–3]. Кстати, эти переходы идут с вершины валентной зоны. Это было подтверждено в [4 и др.]. Поскольку такой эффект проявляется в кристаллах с различной структурой зон и типом решеток, есть основание считать это фундаментальным фактом, не коррелирующим с традиционными представлениями о переходах в кристаллах [5, 6]. Цель настоящей работы – дать объяснение этому эффекту.

I. Согласно [5, 6] “Непрямые переходы из-за своей относительно малой интенсивности существенны только в той области, где невозможны прямые переходы, т.е. ниже их края поглощения”. По различным оценкам непрямые переходы составляют лишь $10^{-2} - 10^{-4}$ от прямых [5]. К сожалению, в этих источниках не учитываются абсолютные величины интенсивности взаимодействия фотонов с электронами, и не все электрон-фононные взаимодействия принимаются во внимание. Учитывалось только рассеивание на акустических колебаниях решетки. Но в [1–3] однозначно выявлено, что при поглощении

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Россия, Санкт-Петербург, Политехническая, 26; e-mail: archives@mail.ioffe.ru.

фотонов с $\hbar\omega \geq 2E_g$ существенно рассеивание на оптических колебаниях решетки. Поэтому гамильтониан H' в равенстве (69.2) источника [5] должен быть дополнен к виду:

$$H' = H'_{\text{э}} + H'_q + H'_{\text{опт}}, \quad (1)$$

где $H'_{\text{опт}}$ – взаимодействие с оптическими колебаниями.

II. Наименее связанные электроны представлены в зоне Бриллюжа окрестностью вершины v -band, как показано на рис. 1. Такие электроны в момент взаимодействия с фотоном должны находиться на максимальном удалении r_{i1} от атомного остова A_i , их поставляющего. Поэтому фотон, входя в элементарную ячейку, имеет возможность прежде всего провзаимодействовать с электроном e_1 , а не с e_2 , находящемся на расстоянии $r_{i2} < r_{i1}$ от остова A_i и более связанного. Кроме того, вероятность непрямого перехода P_{i1} будет больше для электрона e_1 , чем P_{i2} для электрона e_2 , ввиду большего объема V_1 , охватываемого электроном e_1 , чем объем V_2 для e_2 , т.к.

$$V_1 \sim r_{i1}^3 > V_2 \sim r_{i2}^3. \quad (2)$$

Откуда следует, что

$$P_{i1} > P_{i2}. \quad (3)$$

Это тем более справедливо для электрона e_3 , соответствующего прямому переходу (см. рис. 1).

Таким образом, возможность взаимодействия фотона с электронами e_2, e_3 имеется лишь после того, как возможность взаимодействия с электроном e_1 окажется не реализованной. Поэтому должна быть пространственно-временная зависимость характера квантовых переходов, как показано выше, и как следует из рис. 1.

III. Взаимодействие фотонов с электронами кристалла таково, что глубина их проникновения в кристалл l составляет единицы или доли микрона, если исходить из формулы [4–6]:

$$J = J_0 \cdot e^{-ax} = J_0 \cdot e^{-x/l}. \quad (4)$$

Принимая, что линейный размер элементарной ячейки b составляет

$$b = 2a, \quad (5)$$

где a – постоянная решетки кристалла, получим, что до поглощения фотоны успевают пройти $N = l/2a$ элементарных ячеек.

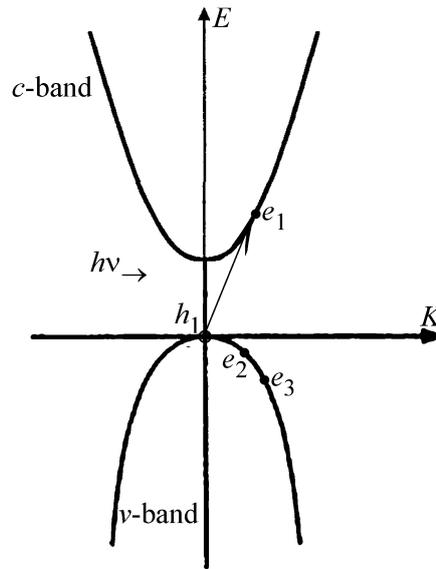


Рис. 1: Зонная структура в *InSb* (не в масштабе) и последовательность возможного взаимодействия фотона в кристалле с валентными электронами.

Следовательно, в соотношении (1) величина $(H'_{\text{opt}} + H'_q)$ должна быть умножена в N раз, поскольку при прохождении каждой элементарной ячейки вновь имеется возможность непрямого квантового перехода, притом, начиная с электрона e_1 . Конкретные оценки для кристаллов Si и *InSb* дают $N \approx 10^2 - 10^3$.

В интегральной форме полную вероятность не прямых и прямых переходов можно представить в следующем виде:

$$P_{1i} = \int_{V_1} \int_0^{t_1} M_1(\vec{r}, \hbar\omega, t, i) dV \cdot dt$$

– вероятность возбуждения e_1 фотоном, где $t = 0$ – момент вхождения фотона в элементарную ячейку, $t = t_1$ – момент выхода из ячейки, M_1 – дифференциальная вероятность взаимодействия фотона с электроном e_1 (функция в неявной форме).

$$P_{2i} = \int_{V_2} \int_{t'_1}^{t_1} M_2(\vec{r}, \hbar\omega, t, i) dV \cdot dt$$

– вероятность возбуждения электрона e_2 фотоном, где $t = t'_1$ – начало взаимодействия фотона с электроном e_2 , $t = t_1$ – момент выхода фотона из ячейки, M_2 – дифференциальная вероятность взаимодействия фотона с электроном e_2 (в неявной форме).

IV. Аналогичная ситуация реализуется в случае, когда возбуждение электрона e_1 совершается не фотоном, а горячим электроном путем ударной ионизации, что было реализовано в экспериментах [1–3] и подтверждено в [4, 7]. В них приводимая трактовка проявилась в следующем: для кристаллов InSb и CdHgTe, где “разрыхленность” электронных мостиков бóльшая, чем в кристаллах InAs и Si в силу бóльших размеров атомов и постоянных решеток a , приращение квантового выхода фотоэффекта η при $\hbar\omega \geq 2E_g$ (путем ударной ионизации непрямыми переходами) бóльшее, чем в последних, т.е. в кремнии и арсениде индия (рис. 2), и вызван пространственно-временным распределением валентных электронов и взаимодействием электронов с фотонами.

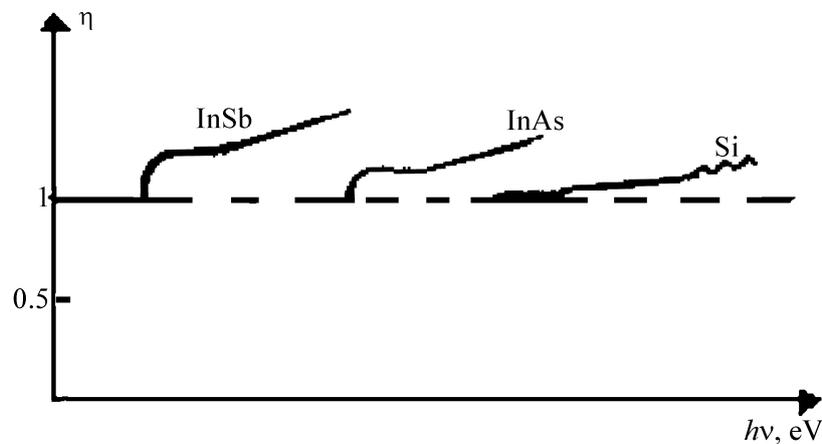


Рис. 2: Зависимость квантового выхода фотоэффекта η от энергии $h\nu$ фотонов в кристаллах. Рост η при энергиях $\geq 2E_g$ связан с непрямыми квантовыми переходами [1–3].

Итак, на чисто энергетическую зависимость поглощения фотонов полупроводниковыми кристаллами накладывается пространственно-временная, влекущая за собой определенную последовательность поглощения фотонов посредством непрямых квантовых переходов, вызванную пространственно-временным распределением валентных электронов.

Данным сообщением, одновременно, дается полное объяснение открытого автором квантового эффекта [1–3] – умножение электронов в полупроводниковых кристаллах, начиная с энергии фотонов $\hbar\omega \geq 2E_g$, а также утверждения, что пороговая энергия ударной ионизации $E_i = E_g$, т.е. энергии запрещенной зоны.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] В. Н. Ивахно, Д. Н. Наследов, Письма в ЖЭТФ **12**, 345 (1970).
- [2] В. Н. Ивахно, Оптический журнал **68**, 13 (2001).
- [3] В. Н. Ивахно, *Сборник трудов конференции “Фундаментальные проблемы оптики”, С.-Петербург, 2002* (С.-Петербург, СПбГУ, 2002), стр. 142.
- [4] Н. С. Барышев, *Свойства и применение узкозонных полупроводников* (Казань, УНИПРЕСС, 2000).
- [5] О. Маделунг, *Теория твердого тела* (М., Наука, 1980).
- [6] Ф. Бассани, Д. Парравичини, *Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах* (М., Наука, 1982).
- [7] Э. И. Заварицкая, Е. Т. Сокол, Письма в ЖЭТФ **53**, 196 (1991).

Поступила в редакцию 21 июля 2014 г.

Печатается по представлению НФО ФИАН.