УДК 621.315.592

ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ НА ТЕРАГЕРЦОВЫХ ЧАСТОТАХ В $Hg_{1-x}Cd_xTe$

Т.Г.ИСМАИЛОВ
Бакинский Государственный Университет
tariyel.i@gmail.com

Вычислен коэффициент оптического поглощения на терагерцовых частотах в $Hg_{1-x}Cd_xTe$ при наличии квазилокальных акцепторных уровней. Показано, что это поглощение можно наблюдать в эксперименте.

Ключевые слова: узкощеловой полупроводник, квазилокальный акцепторный уровень, терагерцовые частоты, оптическое поглощение.

Узкощелевые полупроводники $Hg_{1-x}Cd_xTe$ являются материалами, уникальными по своим физическим свойствам, по разнообразию наблюдаемых в них эффектов и по возможностям практического использования. Эти соединения идеально подходят для создания инфракрасных полупроводниковых лазеров, допускающих работу в области комнатных температур, высокоэффективных термоэлектрических преобразователей, а также высокочувствительных приемников излучения дальнего инфракрасного и субмиллиметрового (терагерцового) диапазонов[1-5].

Вследствие малости ширины запрещенной зоны ε_g и отношения массы электрона к массе тяжелой дырке (m_e/m_h), акцепторные уровни в этих материалах попадая в зону проводимости становятся квазилокальными и следовательно, могут иметь существенное влияние как на кинетические, так и на оптические свойства. [1, 4]. Энергия квазилокального уровня, отсчитываемая от дна зоны проводимости, в зависимости от состава x может изменяться в интервале (2-10) meV, что соответствует терагерцовым частотам.

Область терагерцовых (THz) волн находится между инфракрасными и миллиметровыми волнами. В цифровом выражении этот диапазон соответствует частотам 0.3 – 100 THz или в длинах волн между 3 μm и 1 mm.

В данной спектральной области плохо работают как радиофизические методы (со стороны длинных волн), так и оптические методы (со стороны коротких волн) [6-8].

Несмотря на то, что освоение как микроволнового электромагнитного излучения, так и инфракрасного имеет достаточно длинную историю исследований и практических применений, электромагнитные волны THz диапазона до сих пор представляют мало исследованную область электромагнитного спектра. Такое положение обусловлено как отсутствием надежного, достаточно компактного и мощного источника THz излучения, так и THz детекторов.

В настоящей статье рассмотрено влияние квазилокального акцепторного уровня на оптическое поглощение в бесщелевом $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ($x < 0{,}15$).

Коэффициент оптического поглощения при T=0K $\alpha(\omega)$ пропорционален числу квантовых переходов в единицу времени $W(\omega)$

$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum \left| \langle j | H_{\rm int} | i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_j + \hbar\omega) \qquad (1)$$

Здесь E_i , E_j , $|i\rangle$, $|j\rangle$ - энергии и волновые функции начальных и конечных состояний, соответственно. $H_{\rm int}$ - Гамильтониан взаимодействия рассматриваемой системы с излучением. Суммирование проводится по всем конечным состояниям. В одноэлектронном приближении, когда не учитываются электрон-электронные взаимодействия, состояния $|i\rangle$, $|j\rangle$ представляют собой, соответственно, пустые и занятые одноэлектронные состояния. Причем суммирование по (i) охватывает все занятые, а по (j) все пустые состояния. Волновые функции всех одноэлектронных состояний ортогональны.

В примесном кристалле, даже с простейшим потенциалом примеси $V(\mathbf{r}) = V_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ определение явного вида волновых функций, удовлетворяющих условию ортогональности представляет собой очень трудную задачу. По этой причине невозможно использовать формулу (1) непосредственно для расчета коэффициента поглощения примесного кристалла.

Чтобы вычислить коэффициент поглощения примесного кристалла, преобразуем формулу (1) и придадим ей удобную для расчета форму [9,10]. Воспользуемся представлением вторичного квантования. Гамильтониан взаимодействия системы с электромагнитным полем запишем в виде

$$H_{\rm int} = \frac{e}{m_0 c} \int \psi^+(\mathbf{r}) \mathbf{A} \mathbf{P}_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \ , \qquad (2)$$

где $\psi^+(\mathbf{r})$, $\psi(\mathbf{r})$ - операторы рождения и уничтожения электронов, $\mathbf{P}_{\mathbf{r}}$ - оператор импульса, действующий на координату $\mathbf{r}$. Представляя δ - функцию, входящую в (1), в виде

$$\delta(\frac{E_j - E_i}{\hbar} + \omega) = \mathrm{Re}\frac{1}{\pi}\int \exp\left[i(\frac{E_j - E_i}{\hbar} + \omega)\right] dt \qquad (3)$$

и введя гейзенберговские операторы поля $\psi^+(\mathbf{r},t)$ и $\psi(\mathbf{r},t)$ можно выразить вероятность перехода $W(\omega)$ через причинную двухчастичную функцию Грина

$$W(\omega) = \frac{2}{\hbar^2}\left(\frac{e}{m_0 c}\right)^2 \mathrm{Re}\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}(\mathbf{AP_r})(\mathbf{AP_{r_1}})\int \mathrm{dte}^{\mathrm{i}(\omega+\mathrm{i}\delta)\mathrm{t}} \times$$
$$\left\langle T(\psi^+(\mathbf{r},t)\,\psi(\mathbf{r},t)\,\psi^+(\mathbf{r},0)\,\psi(\mathbf{r},0))\right\rangle. \qquad (4)$$

В одночастичном приближении двухчастичная функция Грина распадается на произведение двух одночастичных функций Грина $G(\mathbf{r},t,\mathbf{r},t)\cdot G(\mathbf{r_1},0,\mathbf{r},t)$ [9,10].

Окончательное выражение для вероятности перехода $W(\omega)$ имеет вид

$$W(\omega) = \frac{2}{\hbar^2}\left(\frac{e}{m_0 c}\right)^2 \frac{1}{(2\pi)^2}\mathrm{Re}\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}_1 \cdot \int dEdE_1 \frac{\mathrm{i}(\mathbf{AP_r})(\mathbf{AP_{r_1}})G(\mathbf{r},t,\mathbf{r},t)\cdot G(\mathbf{r_1},0,\mathbf{r},t)}{\hbar\omega + E_1 - E + i\delta} \qquad (5)$$

Функция Грина определяется уравнением

$$G(\mathbf{r},t,\mathbf{r}_1,0) = G^{(0)}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',0) + \int G^{(0)}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',t'')V_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}'',t'')G(\mathbf{r}'',t'',\mathbf{r}_1',0)d\mathbf{r}''dt'' \quad , (6)$$

где $G^{(0)}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',0)$- функция Грина идеального кристалла, которое в случае δ -образного потенциала легко находится. А функция Грина $G^{(0)}(\mathbf{r},t,\mathbf{r}',0)$ имеет следующий Фурье- образ:

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}_1) = G_E^{(0)}(\mathbf{r},\mathbf{r}_1') + \frac{V_0 G_E^{(0)}(\mathbf{r},\mathbf{r}_0)G_E^{(0)}(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}_1')}{1 - V_0 G_E^{(0)}(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}_0)} \qquad (7)$$

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}) = \sum_{n,k,\sigma}\frac{\varphi^{\bullet}_{nk\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{nk\sigma}(\mathbf{r})}{\hbar\omega - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + i\delta\, sign(\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_F)} \qquad (8)$$

Здесь ε_F - энергия Ферми $\varepsilon_n(\mathbf{k})$, $\varphi_{nk\sigma}(\mathbf{r})$ - энергия и волновая функция электрона в идеальном кристалле, n -номер зоны, k - квазиимпульс, σ -спиновый индекс.

Из выражений (6)-(9) видно, что коэффициент оптического поглощения примесного кристалла может быть вычислен исходя из известных волновых функций и энергий всех зон идеального кристалла.

Далее, в рамках двухзонной инверсной модели Кейна для $Hg_{1-x}Cd_xTe$ вычислен коэффициент оптического поглощения в терагерцовой области.

Известно, что в идеальном кристалле при частотах излучения ω, меньших чем энергия Ферми ε_F электронов ($\hbar\omega < \varepsilon_F$) поглощение отсутствует(эффект Мосса-Бурштейна).В примесном же кристалле поглощение в этой области частот отлично от нуля и определяется наличием примесей, в нашем случае – наличием квазилокальных акцепторных уровней.

Расчет приводит к следующему выражению для коэффициента оптического поглощения

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi\hbar c r_0}{n} \cdot \frac{m_0}{m_h} \sqrt{\frac{E_1}{\varepsilon_0}} \cdot \frac{\widetilde{W}^{(1)}}{\hbar\omega} N_A \theta(\varepsilon_F - E_1 + \hbar\omega)\,, \tag{9}$$

где

$$W^{(1)}(\omega) = \begin{cases} \dfrac{(E_1-\hbar\omega)^{3/2}\varepsilon_g^{1/2}}{E_1^2} \cdot \left[\dfrac{8}{3}\left(\dfrac{E_1}{\hbar\omega}\right)^2 - \dfrac{6}{5}\left(\dfrac{E_1}{\hbar\omega}\right) + 1\right] + \dfrac{(E_1-\hbar\omega)^{1/2}}{\varepsilon_g^{1/2}}; & \varepsilon_g >> \hbar\omega,\ E_1, \\[2ex] \dfrac{(E_1-\hbar\omega)^2}{E_1^2} \cdot \left[\dfrac{4}{3}\left(\dfrac{E_1}{\hbar\omega}\right)^2 - \dfrac{3}{5}\left(\dfrac{E_1}{\hbar\omega}\right) + 1\right] + \dfrac{2}{3}\dfrac{E_1^2}{(2E_1-\hbar\omega)^2}; & \varepsilon_g << \hbar\omega,\ E_1. \end{cases} \tag{10}$$

Здесь $r_0 = \dfrac{e^2}{m_0 c^2}$ - классический радиус электрона, n-коэффициент преломления, N_A- полное число акцепторов в кристалле, E_1- энергия квазилокального уровня, отсчитываемая от дна зоны проводимости, ε_g - ширина запрещенной зоны, $\varepsilon_0 = \dfrac{4P^2 m_h}{3\hbar^2}$ - почти постоянная энергия, m_h - масса тяжелых дырок.

Сделаем оценки для двух значений частоты $\hbar\omega = 0{,}1E_1$ и $\hbar\omega = 0{,}9E_1$:

$$\alpha(0{,}1E_1) \approx \begin{cases} N_A \cdot 3 \cdot 10^{-13}\,\text{ñì}^{-1}, & \varepsilon_g >> \hbar\omega,\ E_1, \\ N_A \cdot 10^{-13}\,\text{ñì}^{-1}, & \varepsilon_g << \hbar\omega,\ E_1, \end{cases} \tag{11}$$

$$\alpha(0{,}9E_1) \approx \begin{cases} N_A \cdot 1{,}5 \cdot 10^{-16}\,\text{ñì}^{-1}, & \varepsilon_g >> \hbar\omega,\ E_1, \\ N_A \cdot 2{,}3 \cdot 10^{-19}\,\text{ñì}^{-1}, & \varepsilon_g << \hbar\omega,\ E_1\ . \end{cases} \tag{12}$$

Как видно из приведенных оценок, зависимости коэффициента поглощения как от частоты ω , так и от ширины запрещенной зоны ε_g должны отчетливо наблюдаться в эксперименте.

ЛИТЕРАТУРА

1.Dornhaus R.,Nimtz G. Narrow-Gap Semiconductors. Springer-Tracts in Mod.Phys. 1983, v.98, №1, p.309.
2.Norton P. HgCdTe Infrared detectors. Opto-Electronics Review, 2002, №10(3), p.159–174.
3.R.Winkler, Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems (Springer-Verlag, Berlin.Heidelberg, 2003).
4. Алиев С.А., Зульфигаров Э.И. Термомагнитные и термоэлектрические явления в науке и технике. Баку: Элм, 2009, 325с.
5. Спирин К.Е., Иконников А.В., Ластовкин А.А., Гавриленко В.И., Дворецкий С.А., Михайлов Н.Н. Спиновое расщепление в гетероструктурах HgTe/CdHgTe (013) с квантовыми ямами ,Письма в ЖЭТФ. 2010, №92, с. 65.
6. D.Khokhlov. New type of infrared photodetectors based on lead telluride and related alloys. *Materials Research Society Symposia Proceedings,* 1998, №484, p.295-300.
7. Khokhlov D., Ryabova L., Nicorici A., Shklover V., Ganichev S., Danilov S., Bel'kov V. Terahertz photoconductivity of Pb1-xSnxTe(In). *Appl. Phys. Lett.*, 2008, №93, 264103 (*3 p*).
8. Romcevic N., Stojanovic D., Romcevic M., Khokhlov D.R. Raman spectroscopy of Pb1−*x*Sn*x*Te (In) single crystals. *Journal of Alloys and Compounds*, 2009, №474, p. 26-30.
9. Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Методы функций Грина в статистической механике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1961, 312 с.
10. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1962, 444 с.

$Hg_{1-x}Cd_xTe$-da TERAHERTZ TEZLİKLƏRİNDƏ OPTİK UDULMA

T.H.İSMAYILOV

XÜLASƏ

$Hg_{1-x}Cd_xTe$($x < 0{,}15$) -da keçiricilik zonasına düşən kvazilokal akseptor səviyyələri hesabına terahertz tezliklərində baş verən optik udulmanın əmsalı hesablanmışdır. Ədədi qiymətləndirmələr göstərir ki, bu udulmanı təcrübədə müşahidə etmək mümkündür.

Açar sözlər: dar qadağan zolaqlı yarımkeçirici, kvazilokal akseptor səviyyəsi, terahertz tezliklər, optik udulma.

OPTICAL ABSORPTION AT THz FREQUENCES IN $Hg_{1-x}Cd_xTe$

T.H.İSMAYILOV

SUMMARY

The coefficient of optical absorption in $Hg_{1-x}Cd_xTe$($x < 0{,}15$) at THz frequences in the presence of quasilocal acceptor levels is calculated. İt is shown that this absorption may be observed in experiments.

Keywords: narrow-gap semiconductors, quasilocal acceptor levels, THz frequences, optical absorption.

Поступила в редакцию: 14.04.2011 г.
Принято к печати: 17.06.2011 г.