

РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ ПРИ ДВУХФОТОННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ A_2B_6 СО СТРУКТУРОЙ ВЮРТЦИТА

Л.Е. Семенова

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,
ул. Вавилова 38, Москва 119991, Россия, sl@kapella.gpi.ru

Рассмотрено резонансное гиперкомбинационное рассеяние света в гексагональных полупроводниках A_2B_6 . Исследовано влияние возможных дипольных переходов на более глубокую валентную зону на частотную зависимость сечения рассеяния для CdSe и ZnO.

Ключевые слова: гиперкомбинационное рассеяние; полупроводник; экситон.

RESONANT SCATTERING UNDER TWO-PHOTON EXCITATION IN A_2B_6 SEMICONDUCTORS WITH THE WURTZITE STRUCTURE

Ludmila Semenova

Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences,
38 Vavilov Str., 119991 Moscow, Russia, sl@kapella.gpi.ru

The paper deals with resonant hyper-Raman scattering of light by LO phonons in A_2B_6 semiconductors with the wurtzite structure. The scattering process involving two-photon transitions to B and C excitons of the s -type was considered taking into account possible dipole transitions to the deeper valence band. Their influence on the frequency dependence of the scattering cross section was investigated for CdSe and ZnO.

Keywords: hyper-Raman scattering; semiconductor; exciton.

Введение

Спектроскопия гиперкомбинационного рассеяния (ГКР) при двухфотонном возбуждении вблизи края поглощения полупроводника позволяет получать информацию не только о колебательной системе, но и электронной. В этом случае основной вклад в ГКР вносит процесс рассеяния, который в рамках экситонной модели можно описать как двухфотонный переход в экситонное состояние, образованное электроном с нижней зоны проводимости и дыркой с верхней валентной зоны, с последующим непрямым переходом в основное состояние. Но двухфотонный дипольный переход происходит через промежуточные состояния, которые таким образом могут оказать влияние на частотную зависимость сечения рассеяния.

Резонансное ГКР на продольных оптических (ЛО) фононах в полупроводниках со структурой вюртцита для геометрии

рассеяния $y(xxz)x$ рассматривалось в работе [1] с учетом смешивания p -подобных и d -подобных состояний, т.е. состояний, преобразующихся по неприводимым представлениям группы симметрии Γ_5 и Γ_6 , в подзоне A и нижележащей валентной зоне v' симметрии Γ_9 [2,3]. В этом случае процесс ГКР обусловлен внутризонным фреilihовским экситон-фононным взаимодействием и включает двухфотонные дипольные переходы в B и C экситоны s -типа, которые при наличии смешивания p - и d -подобных состояний могут происходить через промежуточные s -экситонные состояния, образованные электронами с нижней зоны проводимости s и дырками с более глубокой валентной зоны v' (Γ_9) [1]. На примере кристалла CdS было показано, что в некоторых случаях учет переходов в зону v' может привести к дополнительной особенности на частотной зависимости сечения ГКР [1].

В представленной работе аналогичный процесс ГКР рассматривается для полупроводников ZnO и CdSe, которые по своим характеристикам отличаются от CdS.

Результаты и их обсуждение

В рассматриваемом случае сечение рассеяния можно представить как $d\sigma/d\Omega \propto |B_B + B_C|^2$, где B_B и B_C – вклады процессов ГКР, включающих двухфотонные переходы в В и С экситоны [1]. Допуская смешивание p - и d -подобных состояний и учитывая приближения, используемые в работе [1], можно записать B_B и B_C в следующем виде: $B_B = B_{C'} - DB_{v'}$ и $B_C = C_{C'} + DC_{v'}$, где $B_{C'}$ ($B_{v'}$) и $C_{C'}$ ($C_{v'}$) связаны с переходами на вышележащую зону проводимости c' (на более глубокую валентную зону v').

Параметр D , введенный в работе [1], зависит от волновых функций валентной зоны и матричных элементов межзонных дипольных переходов и в общем случае неизвестен. Поэтому в представленной работе были выполнены расчеты частотных зависимостей сечения резонансного ГКР света на LO фононах в ZnO и CdSe для различных значений D .

На рис. 1(а) показано сечение ГКР в CdSe в зависимости от удвоенной энергии фотонов возбуждающего излучения $2\hbar\omega_L$. В расчетах использовались следующие параметры кристалла: ширина запрещенной зоны для В и С подзон $E_{cv}^B = 1.8571$ эВ и $E_{cv}^C = 2.272$ эВ, соответствующие экситонные энергии связи $R_B = R_C = 0.0161$ эВ [4], энергия LO фонона $\hbar\omega_{LO} = 0.027$ эВ [5], эффективные массы электрона и дырки $m_e = 0.116m$ [6], $m_B^\perp = 0.72m$, $m_B^\parallel = 0.38m$, $m_C^\perp = 0.57m$, $m_C^\parallel = 0.52m$ [7], $E_{cv} = 7.4$ эВ [8], $\Gamma_B = 0.006$ эВ и $\Gamma_C = 0.082$ эВ [4], где Γ – полуширина соответствующего дискретного экситонного уровня. Для экситонных состояний сплошного спектра учитывались $\tilde{\Gamma}_B = R_B$ и $\tilde{\Gamma}_C = \Gamma_C$. Предполагалось, что

расщепление между подзоной С и нижележащей валентной зоной v' составляет 0.6 эВ [8]. Коэффициент $q_7^2 \sim 0.499$, определяющий часть волновых функций u_1 , преобразующихся по неприводимому представлению Γ_1 , в подзоне В, был определен с учетом сил осцилляторов переходов в 1s экситонные состояния В и С серий, данных в работе [4].

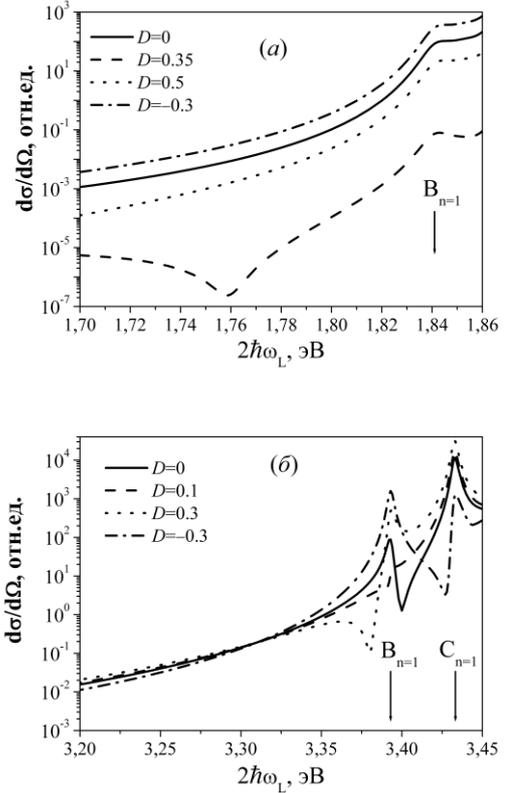


Рис. 1. Сечение резонансного ГКР света на LO фононах в CdSe (а) и ZnO (б) в зависимости от удвоенной энергии фотонов возбуждающего излучения, вычисленное для различных величин D . Стрелками показано положение уровней энергии, соответствующих 1s экситонным состояниям В (B_{n-1}) и С (C_{n-1}) серий

Если $D=0$, т.е. переходы на более глубокую валентную зону отсутствуют, в CdSe основной вклад ГКР определяется В экситонами (B_B), и при $D<0$ он увеличивается. Если $D>0$, то, как видно из рис. 1(а), при некотором значении D ($D=0.35$) сечение рассеяния оказывается значительно меньше чем в случае $D=0$.

Также была рассчитана частотная зависимость сечения ГКР для кристалла ZnO.

При этом учитывались следующие параметры кристалла: $E_{cv}^B = 3.4434$ эВ, $E_{cv}^C = 3.4817$ эВ, $R_B = 0.0504$ эВ, $R_C = 0.0489$ эВ [9], $\hbar\omega_{LO} = 0.0728$ эВ [10], $E_{civ} = 16.51$ эВ, $E_{vvi} = 1.52$ эВ [8], $m_e^\perp = 0.21m$, $m_e^\parallel = 0.23m$, $m_B^\perp = 0.55m$, $m_B^\parallel = 3.03m$, $m_C^\perp = 1.12m$, $m_C^\parallel = 0.27m$ [10]. Коэффициент $q_7^2 \sim 0.13$ был определен ранее [11] из измеренных в работе [12] сил осцилляторов. Расчеты были выполнены для полуширин дискретных состояний $\Gamma = 0.002$ эВ и состояний сплошного спектра $\tilde{\Gamma} = 0.01$ эВ. Результаты представлены на рис. 1(б). Как видно из рисунка, поведение частотной зависимости сечения рассеяния меняется при различных значениях D .

Если переходы на более глубокую валентную зону v' не учитываются ($D=0$), на частотной зависимости сечения рассеяния виден пик, соответствующий двухфотонному резонансу с $1s$ экситоном В серии, который при $D=0.1$ почти не заметен. При $D=0.3$ поведение сечения рассеяния изменяется при приближении к двухфотонному резонансу с экситонным уровнем $B_{n=1}$.

Заключение

Теоретически исследован процесс резонансного ГКР света на LO фононах в полупроводниках CdSe и ZnO со структурой вюрцита с учетом возможных дипольных переходов на более глубокую валентную зону. Показано, что учет этих переходов может в некоторых случаях оказывать заметное влияние на частотную зависимость сечения рассеяния.

Библиографические ссылки

1. Semenova L.E. Resonant hyper-Raman scattering of light by LO phonons in wurtzite semiconductors. *Laser Phys.* 2022; 32(8): 084004.
2. Gutsche E., Jahne E. Spin-orbit splitting of the valence band of wurtzite type crystals. *Phys. Status Solidi* 1967; 19(2): 823-832.
3. Lew Yan Voon L.C., Willatzen M., Cardona M., Christensen N.E. Terms linear in k in the band structure of wurtzite-type semiconductors. *Phys. Rev. B* 1996; 53(16): 10703-10714.
4. Соболев В.В. Зоны и экситоны соединений группы $A^{IV}B^{VI}$. Кишинев: Штиинца; 1980. 256 с.
5. Физические величины: Справочник. Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. Москва: Энергоатомиздат; 1991. 1232 с.
6. Капустина А.Б., Петров Б.В., Родина А.В., Сейсян Р.П. Магнитопоглощение гексагональных кристаллов CdSe в сильных и слабых полях: квазикубическое приближение. *Физика твердого тела* 2000; 42(7): 1207-1217.
7. Horley P.P., Gorley V.V., Gorley P.M., Gonzalez-Hernandez J., Vorobiev Yu.V. On correlation of CdS and CdSe valence band parameters. *Thin Solid Films* 2005; 480-481: 373-376.
8. Kobayashi A., Sankey O.F., Volz S.M., Dow J.D. Semiempirical tight-binding band structures of wurtzite semiconductors: AlN, CdS, CdSe, ZnS, and ZnO. *Phys. Rev. B* 1983; 28(2): 935-945.
9. Mang A., Reimann K., Rubenacke St. Band gaps, crystal-field splitting, spin-orbit coupling, and exciton binding energies in ZnO under hydrostatic pressure. *Solid State Commun.* 1995; 94(4): 251-254.
10. Hanada T. Basic properties of ZnO, GaN, and related materials. In: Yao T., Hong SK (eds) *Oxide and Nitride Semiconductors*. Advances in Materials Research, vol. 12, Springer, Berlin, Heidelberg, 2009. P. 1-19.
11. Семенова Л.Е. Резонансное рассеяние света на LO-фононах при двухфотонном возбуждении вблизи экситонных уровней $A_{n=2}$ и $B_{n=2}$. В кн.: Углов В.В., редактор. Материалы 14-й Международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом». (21-24 сентября 2021 года), г. Минск. Минск: БГУ, 2021. С. 86-89.
12. Gil B. Oscillator strengths of A, B, and C excitons in ZnO films. *Phys. Rev. B* 2001; 60(20): 201310.