

ми; некоторое расхождение может быть вызвано тем, что измерения производились для монокристаллических образцов (во всех трех случаях для грани (100)). Для вольфрама и иридия экспериментальных данных по E_{vibr} не имеется.

Сравнение результатов, полученных в методе многочастичных функционалов плотности и в методе Хюэнберга—Кона—Шэма, позволяет сделать вывод о том, что предлагаемый подход при описании неоднородных ферми-систем обеспечивает большую точность, чем традиционный одночастичный. Это связано с тем, что построение эффективного одночастичного потенциала при замене реального гамильтониана системы суммой одночастичных становится тем труднее, чем большей неоднородностью обладает система. Именно этим обстоятельством объясняется неуспешность одночастичного метода функционалов плотности при описании систем «металл+адатом» [5, 7]. Метод многочастичных функционалов плотности позволяет оперировать истинными потенциалами взаимодействия частиц с внешними полями и между собой, без замены их эффективными одночастичными, что значительно увеличивает возможности этого метода по сравнению с традиционным одночастичным подходом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М., Борзиллов В. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1994. 35, № 2. С. 33.
2. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М., Мельсхаймер О., Нейман Х. // Там же; 1991. 32, № 4. С. 42.
3. Еркович О. С. Функционал кинетической энергии в методе многочастичных функционалов плотности. Деп. ВИНТИ № 1554-В94 от 22.06.94.
4. Теория неоднородного электронного газа/Под. ред. Ф. Лундквиста, Н. М. Марча. М., 1984.
5. Dreizler R. M., Gross E. K. U. Density Functional Theory. Springer-Verlag, 1990.
6. Достижения электронной теории металлов/Под ред. П. Цише, Г. Леманна. Т. 2. М., 1984.
7. Ying S. C., Svith J. R., Kohn W. // Phys. Rev. 1975. B11, N 4, P. 1483.
8. Herft H.-J., Bauer E. // Surf. Sci. 1986. 175, N 21. P. 336.
9. Гречушкина Г. П., Якубенко Э. Ф. // Журнал физ. химии. 1984. 58, № 1. С. 182.
10. Бабенкова Л. В., Благовещенская И. Н. // Там же. 58, № 4. С. 947.
11. Moffat J. B., Voerner D. // Surf. Sci. 1982. 114, N 1. P. 109.
12. Физические величины/Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М., 1991.
13. Karlsson P.-A., Marttenson A.-S., Andersson S., Nordlander P. // Surf. Sci. 1986. 175, N 2. P. L759.

Поступила в редакцию
14.12.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 4

РАДИОФИЗИКА

УДК 535.417

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СЛОЯ С СИЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ ПРОВОДИМОСТИ ОТ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ КОМПОНЕНТЫ ПОЛЯ ВОЛНЫ

М. И. Акимов, А. В. Козарь

(кафедра радиофизики)

Представлена оригинальная простая модель, описывающая оптические свойства веществ, на поверхности которых под воздействием падающей волны возникает диэлектрический пробой. Численные расчеты показали, что в такой системе может возникнуть самовоздействие падающей волны. Дано сравнение с экспериментальными наблюдениями самовоздействия в случае постоянного электрического поля.

Известно, что для диэлектриков возрастание напряженности поля до значений выше некоторого критического может привести к резкому росту концентрации носителей заряда в материале, а значит и его проводимости. Такой эффект в форме диэлектрического пробоя может возникать на поверхности зеркал лазерных резонаторов, в полупроводниковых приборах при мощном полевом воздействии. Диэлектрический пробой может быть вызван как действием постоянного электрического поля, так и воздействием электромагнитной волны. В данной работе исследуется случай квазистатического воздействия волны, однако ставится задача изучить, какое влияние вносят интерференционные эффекты в образце. Наиболее вероятным местом возникновения пробоя является поверхность образца, где порог электрического пробоя ниже, чем в объеме. В большинстве случаев причиной этому служит загрязнение поверхности адсорбированными частицами, наличие на поверхности неоднородностей, нарушение регулярности кристаллической решетки [1, 2]. Пробой на поверхности образца определяется напряженностью поля на фронтальной поверхности, возникающей при интерференции падающей и отраженной волн.

Переход в металлическую фазу обуславливается резким ростом числа носителей заряда — процессом, имеющим лавинообразный характер. Когда «горячие» электроны в результате воздействия электрического поля набирают энергию, достаточную для возбуждения электронно-дырочной пары, и темп их генерации преобладает над темпом рекомбинации, возникает стадия пробоя. Такой механизм пробоя носит характер ионизации, т. е. возбуждения внешним полем электронов и перевода их на более высокие энергетические уровни. Пробой возникает, когда напряженность поля превышает критическое значение, которое для случая статического воздействия обозначим через E_{br} . Механизм пробоя ионизацией является определяющим в случае квазистатического действия поля при выполнении условия

$$\omega^2 \tau_{rel}^2 \ll 1,$$

где ω — циклическая частота сигнала; τ_{rel} — время релаксации электронов; в частности, для рассматриваемого в данной статье случая эти параметры имеют значения: $\omega \approx 10^{12}$ Гц; $\tau_{rel} \approx 10^{-13}$ с для полупроводников при $E \approx 10^5$ В/м [1]. Таким образом, приведенное выше условие хорошо выполняется. Если же это условие не выполняется или же энергия кванта поля близка к энергетической ширине запрещенной зоны, то значительную роль играет многофотонное поглощение. Важно отметить, что при небольшом превышении напряженности поля над критическим значением и последующем его снятии пробой является обратимым процессом.

В объеме образца протекают два конкурирующих процесса: генерация свободных носителей в той области, где $E > E_{br}$, и рекомбинация носителей по объему образца. В результате поглощения в приповерхностном слое напряженность поля уменьшается и принимает значение меньше критического, к тому же критическое значение пробоя на поверхности ниже, чем в объеме вещества. Это позволяет предположить, что генерация электронно-дырочных пар происходит только на поверхности образца и наличие неравновесных носителей в объеме образца обуславливается исключительно диффузией. Таким образом, внутри объема образца носители заряда только рекомбинируют. За время рекомбинации они успевают продиффундировать в глубь образца в среднем на расстояние длины диффузии L . Так как продольная составляющая электрической компоненты поля волны практически отсутствует,

то дрейф будет протекать в условиях «слабого» внешнего поля. Итоговое распределение проводимости вдоль длины образца (оси x) будет экспоненциальным:

$$\sigma = eN\mu_e = \sigma_0 \exp(-x/L), \quad (1)$$

где $L = \sqrt{D_e \tau_{\text{rec}}}$ — диффузионная длина для электронов; $D_e = (kT/e)\mu_e$ — коэффициент диффузии для электронов; τ_{rec} — время рекомбинации электронов; k — постоянная Больцмана; T — температура; e — заряд электрона; μ_e — дрейфовая подвижность электронов; $\sigma_0 = \sigma(x=0) = \sigma(E(x=0))$ — значение проводимости на фронтальной поверхности; $E = E(x=0)$ — значение напряженности поля на фронтальной поверхности;

$$N(E) = N_0 [\exp((q-g)\tau_{\text{rec}}) + 1] \quad (2)$$

— концентрация возбужденных электронов в области их генерации [2]; N_0 — концентрация электронов в равновесном состоянии ($N_0 \approx 10^{12} \text{ м}^{-3}$),

$$q = \left[\frac{e^2 E^2 \tau_{\text{rel}}}{M_e \cdot 1,5 \Delta \mathcal{E}} \right] \quad (3)$$

— скорость генерации электронов; M_e — эффективная масса электрона ($M_e \approx 0,2 m_e$, $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$), $\Delta \mathcal{E}$ — энергетическая ширина запрещенной зоны вещества ($\Delta \mathcal{E} \approx 1 \div 2 \text{ эВ}$), $g = 1/\tau_{\text{rec}}$ — скорость рекомбинации электронов в области генерации.

Время жизни возбужденных носителей в полупроводнике может иметь значение $\tau_{\text{rec}} \approx 10^{-4} \div 10^{-8} \text{ с}$, которое варьируется в зависимости от типа рекомбинации и зависит от концентрации носителей [1].

В свою очередь оптические характеристики образца, и в частности коэффициент отражения, зависят от проводимости отражающего слоя:

$$E(x=0) = E_0 |1 + R| = E_0 |1 + R(\sigma(x=0))|;$$

E_0 — напряженность поля падающей волны.

Точное решение такой задачи потребовало бы самосогласования пространственных распределений проводимости и поля, что привело бы к трудностям при вычислениях. Существенного упрощения в постановке задачи удастся добиться, если считать распределение проводимости по оси x фиксированным. Рассмотрим в такой постановке задачу прохождения волны через вещество с известным распределением электрических параметров. Для ее решения слой с непрерывным распределением комплексной диэлектрической проницаемости заменим набором более тонких слоев (обоснование правомерности такой замены приведено в [3]) и рассмотрим задачу о распространении волны через многослойную структуру. При анализе воспользуемся методом импедансных характеристик, изложенным в [4].

Полученное при решении этой задачи распределение напряженности поля по оси x необходимо согласовать с распределением проводимости по той же оси. Многослойную структуру правомерно в данном случае заменить двухслойной, что приводит к более простой модели металлического слоя на диэлектрической подложке с диэлектрической проницаемостью ϵ (рис. 1). Действительно, при выбран-

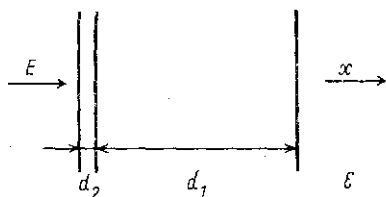


Рис. 1. Модель металлического слоя на диэлектрической подложке с диэлектрической проницаемостью ϵ

ных частоте волны и параметрах вещества длина волны значительно превышает толщину металлического слоя, что и дает возможность использовать подобную модель. Для такой модели тонкого металлического покрытия на подложке, положив, что до пробоя слой был четвертьволновым, а также допуская, что после пробоя выполняется условие $d_1 \gg d_2$, для коэффициентов отражения и пропускания имеем [3]:

$$R = \frac{Z_2 - 1}{Z_2 + 1};$$

$$T = 2 \frac{\sqrt{\epsilon}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon_2}} \frac{1 + Z_2 \sqrt{\epsilon_2}}{1 + Z_2} \exp(-i\varphi_2);$$
(4)

где Z_2 — входной импеданс второго слоя: $Z_2 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_2}} \frac{\sqrt{\epsilon_2} + \epsilon \operatorname{th}(i\varphi_2)}{\epsilon + \sqrt{\epsilon_2} \operatorname{th}(i\varphi_2)}$; $\epsilon_2 = \epsilon - i \frac{\bar{\sigma}}{\omega \epsilon_0}$; ϵ_0 — константа системы единиц; $\bar{\sigma}$ — средняя по длине второго слоя проводимость; $\varphi_2 = k_2 d_2$ — набег фазы в слое; $k_2 = k_0 \sqrt{\epsilon_2}$; $k_0 = 2\pi/\lambda$; λ — длина волны в свободном пространстве.

Металлический слой предполагается однородным, с толщиной d_2 и проводимостью, определяемой проводимостью в области генерации носителей заряда. Пробой в веществе возникает при некотором критическом значении N_{br} концентрации электронов. Внутри металлического слоя концентрация электронов не должна быть меньше критического значения. Из этого условия и находим толщину слоя d_2 . Считая, что для рассматриваемого вещества $N_{br} = 10^8 N_0$, из (1), (2) получаем

$$d_2 = 0 \quad \text{при } E(x=0) < E_{br};$$

$$d_2 = L((q-g)\tau_{rec} - 7) \quad \text{при } E(x=0) > E_{br}.$$

Зная длину образца, можно найти среднюю по длине второго слоя проводимость, используемую в формуле (4). Из (2) после усреднения находим

$$\bar{\sigma} = \frac{\sigma_0}{(q-g)\tau_{rec} - 7}. \quad (5)$$

Также из физических представлений о явлении пробоя можно предположить, что при тысячекратном увеличении концентрации возбужденных электронов по сравнению с равновесным состоянием справедлива следующая формула для критического поля:

$$E_{br} = \left[\frac{10,5 M_e \Delta \mathcal{E}}{e^2 \tau_{rel} \tau_{rec}} \right]^{1/2}.$$

Для рассматриваемых в статье параметров $E_{br} \approx 4,9 \cdot 10^4$ В/м.

Сначала рассмотрим случай, когда на фронтальную поверхность образца приходится максимальное значение напряженности поля. Такая система оказывается неустойчивой, и она переходит из одного состояния в другое. На рис. 2 представлены расчетные графики зависимости коэффициентов отражения (R), пропускания (T) и поглощения (A) от напряженности поля падающей волны. Действительно, при превышении критического значения напряженности поля на фронтальной поверхности происходит генерация квазисвободных электронов. В ре-

зультате этого возрастает проводимость слоя и, следовательно, коэффициент отражения от него, что приводит к уменьшению напряженности поля на поверхности и даже ее снижению ниже критического уровня. Процесс генерации электронов прекращается, и спустя промежуток времени, равный времени рекомбинации τ_{rec} , система возвращается в равновесное состояние. Проводимость слоя и коэффициент отражения

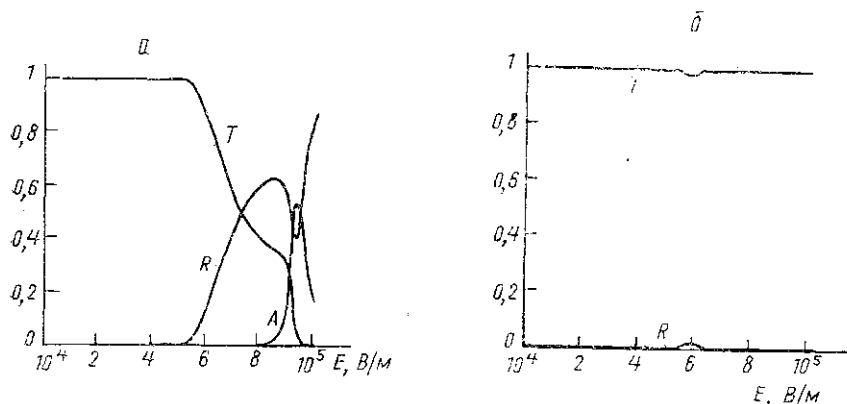


Рис. 2. Зависимость коэффициентов пропускания, отражения и поглощения от напряженности электрической компоненты падающей волны в случае максимума поля, приходящегося на фронтальную поверхность слоя: фаза 1 (а) и фаза 2 (б); $\Delta E = 1$ эВ, $\tau_{\text{rel}} = 10^{-6}$ с

уменьшаются, напряженность поля на поверхности возрастает, и цикл повторяется. Наличие «переключений» не зависит от конкретного вида зависимости концентрации от напряженности поля, важно, чтобы при превышении критического значения существенно росла концентрация и существовала возможность релаксации системы.

Теперь рассмотрим случай, когда на фронтальную поверхность образца приходится минимальное значение напряженности поля. В данной ситуации система также оказывается неустойчивой и обладает двумя характерными состояниями. Результаты расчетов для коэффициентов отражения, пропускания и поглощения для отражающего покрытия приведены на рис. 3. При включении поля передний фронт волны вызывает пробой на фронтальной поверхности образца и возникает неустойчивая ситуация, описанная выше. Волна, прошедшая сквозь «металлический» слой, отражается от задней поверхности образца, возвращается и взаимодействует с падающей волной, изменяя значение напряженности поля на фронтальной поверхности. Если результирующая напряженность поля меньше критического значения, то система приходит в равновесное состояние. Таким образом, критический порог пробоя увеличивается по сравнению со случаем статического поля.

Очевидно, что критическое значение напряженности поля различно при пробое в образце, вызванном электромагнитной волной или действием постоянного электрического поля, причем это различие зависит от волновых свойств образца.

Интересно, что генерация носителей заряда происходит под воздействием самой волны. В оптическом диапазоне такое самовоздействие дает возможность создания оптических ограничителей. Световое излучение, энергия которого несколько меньше, чем ширина запрещен-

ной зоны полупроводника, при низкой интенсивности свободно проходит через вещество. С ростом интенсивности, при достижении некоторого критического значения, включается механизм нелинейного поглощения (отражения) сигнала, что приводит к ограничению мощности

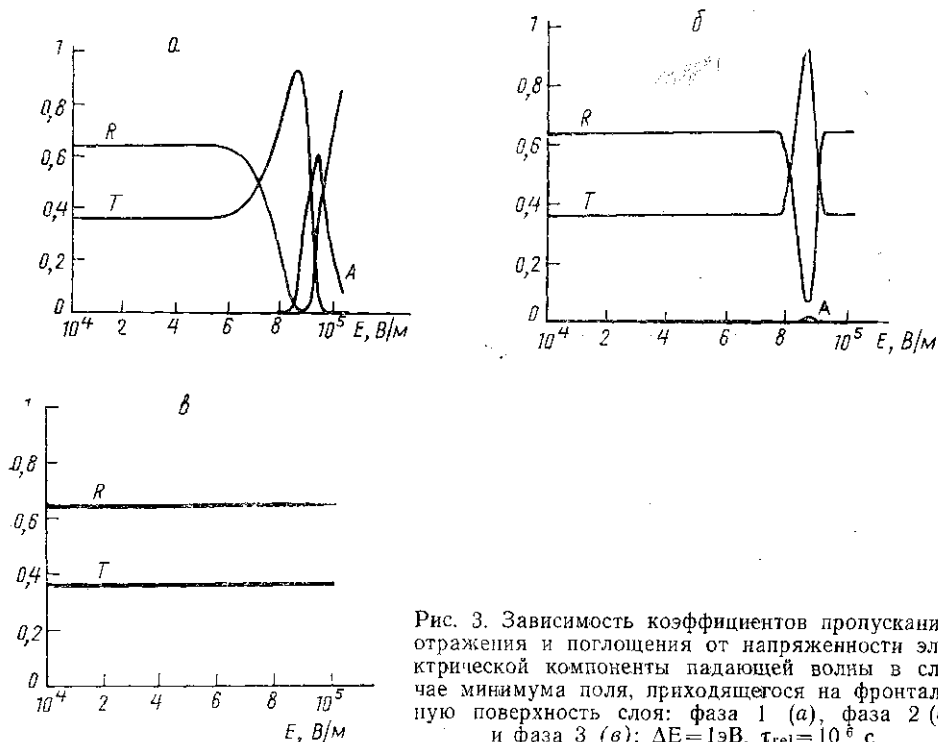


Рис. 3. Зависимость коэффициентов пропускания, отражения и поглощения от напряженности электрической компоненты падающей волны в случае минимума поля, приходящегося на фронтальную поверхность слоя: фаза 1 (а), фаза 2 (б) и фаза 3 (в); $\Delta E = 1 \text{эВ}$, $\tau_{\text{rel}} = 10^6 \text{с}$

прошедшей через структуру волны [5]. В работе [6] представлены экспериментальные результаты наблюдения и дается теоретическое обоснование неустойчивости в полупроводниках под воздействием постоянного электрического поля. В результате возникновения пробоя и его неустойчивости наблюдалась генерация импульсов с периодом следования порядка времени жизни носителей зарядов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Смит Р. Полупроводники. М., 1982. Гл. 22.
2. Шен И. Р. Принципы нелинейной оптики. М., 1989. Гл. 23.
3. Бреховских Л. М. Волны в слоистых средах. М., 1973.
4. Козарь А. В., Колесников В. С., Пирогов Ю. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1978. 19, № 1. С. 78.
5. Bogess T. F., Smirl A. L., Dubard J. et al. // Opt. Engineering. 1991. 30, N 5. P. 629.
6. Clauss W., Kittel A., Rau U. et al. // Europhys. Lett. 1990. 12, N 5. P. 423.

Поступила в редакцию
15.06.94