

## Взаимодействие электромагнитной Н-волны с наноструктурой „диэлектрик-полупроводник-диэлектрик“ с учетом анизотропии зонной структуры полупроводника

© И.А. Кузнецова, О.В. Савенко

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,  
150003 Ярославль, Россия

e-mail: savenko.oleg92@mail.ru

Поступила в редакцию 15.04.2023 г.

В окончательной редакции 28.04.2023 г.

Принята к публикации 28.04.2023 г.

Решена задача о взаимодействии электромагнитной Н-волны со слоистой наноструктурой „диэлектрик-полупроводник-диэлектрик“. Толщина полупроводникового слоя может быть сравнима или меньше длины волны де Бройля носителя заряда. Поверхностное рассеяние носителей заряда учитывается через граничные условия Соффера. Предполагается, что частота электромагнитной волны меньше частоты плазменного резонанса. В рассматриваемом случае поверхность постоянной энергии представляет собой эллипсоид вращения. Получены аналитические выражения для коэффициентов отражения, пропускания и поглощения. Выполнены расчеты для предельных случаев вырожденного и невырожденного электронного газа. Проведен анализ зависимостей оптических коэффициентов от безразмерных параметров: толщины полупроводникового слоя, частоты и угла падения электромагнитной волны, химического потенциала, параметра эллиптичности, диэлектрических проницаемостей изолирующих слоев и параметров шероховатости границ раздела „полупроводник-диэлектрик“.

**Ключевые слова:** слоистая наноструктура, уравнение Лиувилля, длина волны де Бройля, модель Соффера, оптические коэффициенты.

DOI: 10.21883/OS.2023.07.56132.4865-23

### Введение

В настоящее время основу всей полупроводниковой наноэлектроники составляют слоистые наноструктуры, состоящие из полупроводниковых, металлических и диэлектрических слоев. Особый интерес вызывает у исследователей применение нанопокрывтий в солнечной энергетике. Ведутся разработки, посвященные увеличению способности солнечных элементов эффективно преобразовывать электромагнитное излучение в электрическую энергию [1–4]. Как показали исследования, наибольшим КПД (примерно 35%) обладают гибкие солнечные элементы на основе GaAs [2]. Проводятся исследования по увеличению энергоэффективности солнечных элементов путем выращивания нитевидных наноструктур с антиотражающими свойствами на поверхности нанослоя [3]. Актуальной задачей является улучшение физических параметров оптических приборов посредством нанесения полупроводниковых нанопокрывтий [5].

В настоящее время активно совершенствуются технологические методы, позволяющие выращивать наноструктуры, толщина слоев которых может составлять несколько атомных слоев. В этом случае для теоретического описания явлений переноса в нанослоях необходимо учитывать квантование энергетического спектра носителей заряда. В литературе известен ряд теоретических работ, в которых для расчета электрических

и оптических параметров нанослоев рассматривалась модель электронного газа, заключенного в потенциальную яму с гладкими стенками [6–8]. При малых толщинах неровность поверхности на атомарном уровне существенно влияет на явления переноса носителей заряда в нанослое, поэтому возникает необходимость в обобщении моделей, применяемых в работах [6–8], на случай неровной поверхности.

Вопрос об учете поверхностного рассеяния для решения квантовых задач о статической проводимости тонкой металлической пленки рассматривался в работах [9–13]. В работах [9–11] использован метод функций Грина, согласно которому потенциал поверхностного рассеяния носителей заряда рассматривался как потенциал возмущения. Задача о нахождении волновых функций в квантовой яме сводилась к определению функции Грина решением уравнения Дайсона. В работах [12,13] производился непосредственный расчет интеграла поверхностных столкновений. В работах [14–16] был использован метод граничных условий Соффера [17] для расчета электрических и гальваномагнитных параметров проводящего нанослоя. Этот же метод применялся для построения теоретических моделей взаимодействия электромагнитного излучения с полупроводниковым нанослоем [18] и со слоистой наноструктурой „диэлектрик-полупроводник-диэлектрик“ [19]. Отметим, что в рабо-

тах [18,19] рассматривался случай полупроводника со сферической зонной структурой.

В наноэлектронике и солнечной энергетике широко используются нанослои из кремния и германия. Поверхность постоянной энергии в таких полупроводниках имеет несферическую форму и состоит из нескольких эллипсоидов вращения. В настоящей работе проведено обобщение теоретической модели, построенной в работе [19], на случай эллипсоидальной формы изоэнергетической поверхности полупроводника.

## Постановка задачи

Рассмотрим наноструктуру, представляющую собой полупроводниковый нанослой толщины  $a$ , помещенный между двумя изолирующими слоями с различными диэлектрическими проницаемостями. На слоистую наноструктуру падает плоская монохроматическая электромагнитная волна. Введем систему координат таким образом, чтобы координатные оси  $X$  и  $Y$  были направлены параллельно плоскости нанослоя, а ось  $Z$  — вглубь нанослоя. Рассматривается случай  $H$ -конфигурации электромагнитной волны, т.е. вектор напряженности электрического поля параллелен оси  $X$ . Диэлектрические слои являются немагнитными, а верхний изолирующий слой — непоглощающий.

Толщина полупроводникового нанослоя может быть сравнимой или меньше длины волны де Бройля носителей заряда. В этом случае энергетический спектр носителей заряда в перпендикулярном к плоскости наноструктуры направлении квантуется. Предполагается, что поверхность постоянной энергии представляет собой эллипсоид вращения с главной осью, параллельной плоскости нанослоя. Рассматриваются случаи, когда ось вращения параллельна и перпендикулярна вектору напряженности электрического поля (назовем их соответственно продольным и поперечным к электрическому полю направлениями оси). Выражение для полной энергии электрона (дырки) имеет вид

$$\varepsilon_l = \frac{m_{\parallel,\perp}}{2} v_x^2 + \frac{m_{\perp,\parallel}}{2} v_y^2 + \varepsilon_{zl}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{zl} = (\pi\hbar l)^2 / (2m_{\perp} a^2)$  — собственное значение энергии носителя заряда на  $l$ -й подзоне,  $m_{\parallel}$  и  $m_{\perp}$  — соответственно продольная и поперечная эффективные массы электрона (дырки), первый индекс при  $m$  в выражении (1) соответствует продольному направлению главной оси эллипсоида, а второй индекс — поперечному направлению,  $\hbar$  — постоянная Планка.

В настоящей работе предполагается малое отклонение системы носителей заряда от состояния равновесия. В этом случае уравнение Лиувилля можно привести к следующему виду [15]:

$$-i\omega f_l + v_{zl} \frac{\partial f_l}{\partial z} + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f_l}{\partial \mathbf{k}_{\parallel}} = -\frac{f_l - f_l^{(0)}}{\tau}, \quad (2)$$

где  $\tau$  — время релаксации,  $\omega$  — частота электромагнитной волны,  $f_l$  — функция распределения носителей заряда на  $l$ -й подзоне, играющая роль диагонального элемента матрицы плотности  $\rho_{ll}$ ,  $f_l^{(0)}$  — равновесная функция распределения,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $\mathbf{E}$  — напряженность электрического поля,  $v_{zl}$  —  $z$ -компонента скорости носителя заряда на  $l$ -й подзоне,  $e$  — заряд электрона (дырки).

Для функции  $f_l$  справедливо разложение [15]

$$f_l(z, \mathbf{k}_{\parallel}, t) = f_l^{(0)} + f_l^{(1)}(z, \mathbf{k}_{\parallel}) \exp(-i\omega t), \quad (3)$$

$$f_l^{(0)} = \frac{1}{1 + \exp((\varepsilon_l - \mu)/k_0 T)}, \quad (4)$$

где  $f_l^{(1)}$  — неравновесная поправка,  $\mu$  — химический потенциал,  $k_0$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура.

Отметим, что в случае эллипсоидальной зонной структуры полупроводника время релаксации является тензором второго ранга [14,15,20]:

$$\tau = \begin{pmatrix} \tau_{\parallel,\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{\perp,\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{\perp} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Здесь первый индекс соответствует продольной ориентации главной оси вращения эллипсоида постоянной энергии, а второй — поперечной ориентации. Параметр  $\tau_{\parallel}$  представляет собой характерное время установления равновесного состояния системы носителей заряда под действием внешней силы, направленной параллельно главной оси эллипсоида вращения соответственно, а  $\tau_{\perp}$  — перпендикулярно главной оси. Для нахождения поправки к функции распределения в случае продольной ориентации оси вращения эллипсоида постоянной энергии необходимо подставить в уравнение (2) параметр  $\tau_{\parallel}$ , а в случае поперечной ориентации —  $\tau_{\perp}$ .

В качестве граничных условий используется модель Соффера [17], учитывающая зависимость коэффициентов зеркальности поверхностей нанослоя  $q_{1,2}$  от параметров шероховатости  $g_{1,2}$  и угла падения носителя заряда на внутреннюю поверхность нанослоя  $\vartheta$ :

$$\begin{cases} f_l^{(1)+} = q_1(g_1, \vartheta) f_l^{(1)-} & \text{при } z = 0, \\ f_l^{(1)-} = q_2(g_2, \vartheta) f_l^{(1)+} & \text{при } z = a, \end{cases} \quad (6)$$

$$q_{1,2}(g_{1,2}, \vartheta) = \exp(-(4\pi g_{1,2} \cos \vartheta)^2), \quad (7)$$

$$g_{1,2} = \frac{g_{s1,2}}{\lambda_B}, \quad (8)$$

где  $f_l^{(1)\pm}$  — соответственно функции распределения электронов (дырок) с положительной и отрицательной проекциями волнового вектора на ось  $Z$ ,  $g_{s1,2}$  — соответственно среднеквадратичная высота поверхностного рельефа верхней и нижней поверхности,  $\lambda_B$  — длина волны де Бройля носителей заряда.

Плотность тока и интегральная проводимость в случае продольной и поперечной ориентаций оси вращения

эллипсоида постоянной энергии определяются выражениями [14,15]

$$j_{\parallel,\perp} = \frac{2ek_z1}{(2\pi)^3} \sum_l \iint v_x (f_{l\parallel,\perp}^{(1)+} + f_{l\parallel,\perp}^{(1)-}) dk_x dk_y, \quad (9)$$

$$\sigma_{a\parallel,\perp} = \int_0^a \frac{j_{\parallel,\perp}}{E_x} dz, \quad (10)$$

где  $k_{z1}$  —  $z$ -компонента волнового вектора носителя заряда, находящегося в первой подзоне,  $f_{l\parallel}^{(1)\pm}$  и  $f_{l\perp}^{(1)\pm}$  — соответственно неравновесные поправки к функциям распределения носителей заряда в случае продольного и поперечного направлений главной оси эллипсоида постоянной энергии.

В настоящей работе предполагается, что диапазон частот электромагнитного излучения ограничен сверху частотой плазменного резонанса. Электромагнитная волна является слабой, поэтому эффекты, связанные с квантовой природой электромагнитного излучения, не учитываются. Поведение электромагнитной волны может быть описано уравнениями Максвелла, с помощью которых можно определить оптические коэффициенты:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_x}{\partial z} = ikH_y, \\ \frac{\partial H_y}{\partial z} - ik(1 - \sin^2 \theta)E_x = -\frac{4\pi}{c} j. \end{cases} \quad (11)$$

Здесь  $k$  — модуль волнового вектора,  $\theta$  — угол падения электромагнитной волны,  $c$  — скорость света в вакууме.

## Математические расчеты

Задача решается методом, аналогичным изложенному в работе [15]. Решая уравнение (2) с учетом граничных условий (6), подставляя выражение для функции распределения в (9) и (10), получим следующее выражение для интегральной проводимости:

$$\begin{aligned} \sigma_{a\parallel,\perp} &= \frac{8\pi e^2 a k_0 T v_{z1}}{v_{\parallel,\perp} m_{\parallel,\perp} \sqrt{m_{\parallel} m_{\perp}}} \left(\frac{m_0}{h}\right)^3 \\ &\times \sum_{l=1}^{\infty} \ln \left( \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_{zl}}{k_0 T}\right) + 1 \right) (1 - \chi(\Omega_{\parallel,\perp})), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\chi(p) = \frac{1}{2p} (1 - e^{-p}) \frac{2 - q_1 - q_2 + (q_1 + q_2 - 2q_1 q_2) e^{-p}}{1 - q_1 q_2 e^{-2p}}, \quad (13)$$

$$m_0 = \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp}^2}, \quad \Omega_{\parallel,\perp} = \frac{av_{\parallel,\perp}}{v_{zl}}. \quad (14)$$

Здесь введено обозначение  $v_{\parallel,\perp} = \tau_{\parallel,\perp}^{-1} - i\omega$  — комплексные частоты рассеяния носителя заряда, движущегося в направлениях, параллельном и перпендикулярном главной оси эллипсоида постоянной энергии соответственно,  $v_{z1}$  —  $z$ -компонента скорости носителя заряда в первой подзоне.

Связь между коэффициентами отражения  $R$ , пропускания  $T$ , поглощения  $A$  и интегральной проводимостью  $\sigma_a$  (12) получим, используя результаты работы [21]:

$$R = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta} (\bar{p} + p_1 p_2) + \cos \theta (\bar{p} - p_1 p_2)}{\sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta} (1 + \bar{p}) + \cos \theta (1 - \bar{p})} \right|^2, \quad (15)$$

$$T = \cos \theta \operatorname{Re}(\sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta})$$

$$\times \left| \frac{p_2 - p_1}{\sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta} (1 + \bar{p}) + \cos \theta (1 - \bar{p})} \right|^2, \quad (16)$$

$$A = 1 - R - T, \quad (17)$$

$$\bar{p} = \frac{p_1 + p_2}{2}, \quad \varepsilon = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}, \quad p_1 = -1, \quad p_2 = \frac{\sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta - B}{\sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta + B}, \quad (18)$$

$$B = \frac{2\pi\sigma_a}{c \cos \theta}, \quad (19)$$

где  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  — диэлектрические проницаемости верхнего и нижнего изолирующего слоя.

Отметим, что в работе [21] рассматривался случай зеркальных граничных условий и сферической изоэнергетической поверхности.

Соотношения (15)–(19) можно использовать при рассмотрении эллипсоидальной зонной структуры, если вектор напряженности электрического поля ориентирован параллельно или перпендикулярно оси вращения эллипсоида. В этой ситуации вектор плотности тока будет параллелен напряженности электрического поля. В случае продольного направления главной оси эллипсоида постоянной энергии в формулу (19) необходимо подставить  $\sigma_{a\parallel}$ , а в случае поперечной ориентации —  $\sigma_{a\perp}$ .

Поставляя выражение для  $\sigma_{a\parallel,\perp}$  в функцию  $B$  (20), получим

$$\begin{aligned} B_{\parallel,\perp} &= \frac{16\pi^2 e^2 a k_0 T v_1}{c \cos \theta v_{\parallel,\perp} m_{\parallel,\perp} \sqrt{m_{\parallel} m_{\perp}}} \left(\frac{m_0}{h}\right)^3 \\ &\times \sum_{l=1}^{\infty} \ln \left( \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_{zl}}{k_0 T}\right) + 1 \right) (1 - \chi(\Omega_{\parallel,\perp})), \end{aligned} \quad (20)$$

где  $B_{\parallel}$  соответствует продольному направлению главной оси эллипсоида, а  $B_{\perp}$  — поперечному.

Для анализа полученных выражений необходимо ввести безразмерные параметры

$$u_{zl} = \frac{\varepsilon_{zl}}{k_0 T}, \quad u_{\mu} = \frac{\mu}{k_0 T}, \quad (21)$$

$$x_0 = \frac{a}{\lambda_{B\perp}}, \quad x_{\lambda} = \frac{\Lambda}{\lambda_{B\perp}}, \quad y_0 = \omega \tau_{0v}, \quad (22)$$

$$z_{0\parallel,\perp} = v_{\parallel,\perp} \tau_{0v} = \frac{\tau_{0v}}{\tau_{\parallel,\perp}} - i\omega \tau_{0v} = \kappa_{\parallel,\perp} - iy_0, \quad (23)$$

$$\rho = \frac{v_{0v}}{c}, \quad y_p = \omega_p \tau_{0v}, \quad \gamma = \frac{m_{\perp}}{m_0}, \quad (24)$$

где  $\Lambda$  — длина свободного пробега носителей заряда с учетом объемного рассеяния,  $\tau_{0v}$  — скалярное время релаксации в макроскопическом образце, определяющееся через продольные и поперечные компоненты тензора релаксации  $\tau_v$  следующим образом:

$$\tau_{0v} = \sqrt[3]{\tau_{v\parallel}\tau_{v\perp}^2}. \quad (25)$$

Параметры  $u_{z1}$  и  $u_{\mu}$  — характеризуют соответственно дискретную составляющую полной энергии носителя заряда и химический потенциал, нормированные на  $k_0T$ ;  $y_0$  и  $y_p$  — соответственно произведение частоты электромагнитной волны и плазменной частоты  $\omega$  на параметр  $\tau_{0v}$ . Параметры  $x_0$  и  $x_{\lambda}$  представляют собой толщину нанослоя и длину свободного пробега носителей заряда, нормированные на длину волны де Бройля носителя заряда  $\lambda_{B\perp}$  в направлении, перпендикулярном плоскости наноструктуры;  $\rho$  — отношение характерной скорости носителя заряда  $v_{0v}$  к скорости света (про характерные скорости речь пойдет ниже).

В параметре  $z_{0\parallel,\perp}$  фигурирует отношение скалярного времени релаксации в макроскопическом образце к продольной (поперечной) компоненте тензора времени релаксации. Найдем связь между продольными (поперечными) компонентами тензора релаксации  $\tau$  и скалярным временем релаксации  $\tau_0$ , определяемым аналогично (25). Из выражения для полной энергии носителя заряда (1) следует, что отношение между большой и малой полуосями эллипсоида вращения в пространстве скоростей равно  $\sqrt{m_{\perp}/m_{\parallel}}$ . В настоящей работе предполагается, что параметр  $\Lambda$  определяется рассеянием на примесях и дефектах кристаллической решетки и не зависит от толщины полупроводникового нанослоя. Средняя скорость носителя заряда обратно пропорциональна времени релаксации. Отношение между продольной и поперечной компонентами тензора релаксации будет равно  $\sqrt{m_{\parallel}/m_{\perp}}$ . Из вышесказанного следует

$$\tau_0 \sqrt[3]{\tau_{\parallel}\tau_{\perp}^2} = \sqrt[6]{\frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}}} \tau_{\perp} = \sqrt{\frac{m_0}{m_{\perp}}} \tau_{\perp}, \quad (26)$$

$$\tau_0 = \sqrt[3]{\frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}}} \tau_{\parallel} = \sqrt{\frac{m_0}{m_{\parallel}}} \tau_{\parallel}, \quad (27)$$

$$\kappa_{\parallel,\perp} = \frac{\tau_{0v}}{\tau_{\parallel,\perp}} = \sqrt{\frac{m_0}{m_{\parallel,\perp}}} \frac{\tau_{0v}}{\tau_0} = \sqrt{\frac{m_0}{m_{\parallel,\perp}}} \frac{v_0}{v_{0v}}, \quad (28)$$

$v_0$  и  $v_{0v}$  — соответственно характерные скорости носителей заряда с учетом и без учета квантования энергетического спектра носителей заряда, которые вводятся следующим образом:

$$nv_0^2 = 4\left(\frac{m_0}{h}\right)^3 v_{z1} \frac{5}{3} \sum_{l=1}^{\infty} \iint V_l^2 f_l^{(0)} dv_x dv_y, \quad (29)$$

$$n_0 v_{0v}^2 = 2\left(\frac{m_0}{h}\right)^3 v_{z1} \frac{5}{3} \sum_{l=1}^{\infty} \iiint V^2 f_0 d^3v, \quad (30)$$

$$V_l^2 = \frac{(m_{\parallel}v_x^2 + m_{\perp}v_y^2 + m_{\perp}v_z^2)}{m_0}, \quad (31)$$

$$V^2 = (m_{\parallel}v_x^2 + m_{\perp}v_y^2 + m_{\perp}v_z^2)/m_0. \quad (32)$$

Здесь  $n$  и  $n_v$  — соответственно концентрация носителей заряда с учетом и без учета квантования энергетического спектра носителей заряда, определяемые в работах [14,15].

Интегрируя выражения (29), (30), получим

$$v_{0v} = \left(\frac{10}{3} \frac{k_0T}{m} \frac{I_{3/2}}{I_{1/2}}\right)^{1/2}, \quad (33)$$

$$v_0 = \left(\frac{10}{3} \frac{k_0T}{m} \frac{K}{P}\right)^{1/2}, \quad (34)$$

$$I_s = \int_0^{\infty} \frac{u^s du}{\exp(u - u_{\mu}) + 1}, \quad (35)$$

$$K = \sum_{l=1}^{\infty} \int_{u_{z1}}^{\infty} \frac{u du}{\exp(u - u_{\mu}) + 1}, \quad (36)$$

$$P = \sum_{l=1}^{\infty} \ln(\exp(u_{\mu} - u_{z1}) + 1). \quad (37)$$

В случае вырожденного электронного газа  $v_0, v_{0v}$  переходят в эффективную скорость Ферми  $V_F = \sqrt{2\varepsilon_F/m_0}$ , а в случае невырожденного ферми-газа имеют порядок средней тепловой скорости носителей заряда [14,15].

С учетом вышеназванных безразмерных параметров выражения для функций  $B_{\parallel}$  и  $B_{\perp}$  принимает вид

$$B_{\parallel,\perp} = \frac{\rho y_p^2 \sqrt{u_{0v}}}{4 \cos \theta x_0 I_{1/2} z_{0\parallel,\perp} \Phi_{\parallel,\perp}(\gamma)} \times \sum_{l=1}^{\infty} \ln(\exp(u_{\mu} - u_{z1}) + 1) \left(1 - \chi\left(\frac{2x_0^2 z_{0\parallel,\perp} \sqrt{\gamma}}{l x_{\lambda} \Phi_{\parallel,\perp}(\gamma)}\right)\right). \quad (38)$$

Здесь введены обозначения

$$\Phi_{\perp}(\gamma) = \sqrt{\gamma}, \quad \Phi_{\parallel}(\gamma) = \frac{1}{\gamma}, \quad \frac{m_0 v_{0v}^2}{2k_0T}. \quad (39)$$

### Предельные случаи

Рассмотрим случай сферической зонной структуры ( $\gamma = 1$ ). В этой ситуации результаты, полученные с учетом продольной и поперечной ориентаций главной оси эллипсоида постоянной энергии, совпадают друг с другом. Положив  $\gamma = 1$  в (38), получим

$$B_{\parallel} = B_{\perp} = \frac{\rho y_p^2 \sqrt{u_{0v}}}{4 \cos \theta x_0 I_{1/2} z_0} \sum_{l=1}^{\infty} \ln(\exp(u_{\mu} - u_{z1}) + 1) \times \left(1 - \chi\left(\frac{2x_0^2 z_0}{l x_{\lambda}}\right)\right). \quad (40)$$

Полученный результат совпадает с результатами работы [19].

Рассмотрим случай вырожденного электронного газа ( $u_\mu \gg 1$ ), соответствующий высокой концентрации, малой эффективной массе носителей заряда и низкой температуре. Равновесная функция распределения принимает вид ступенчатой аппроксимации:

$$f_l^{(0)}(\varepsilon_l) = \begin{cases} 1, & 0 < \varepsilon_l < \varepsilon_F, \\ 0, & \varepsilon_l > \varepsilon_F, \end{cases} \quad (41)$$

где  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми.

Коэффициенты отражения, пропускания и поглощения будут определяться выражениями (15)–(17), в которых функции  $B_{\parallel}$  и  $B_{\perp}$  имеют следующий вид:

$$B_{\parallel,\perp} = \frac{3\rho y_p^2}{8x_\lambda z_{0\parallel,\perp} \cos \theta \Phi_{\parallel,\perp}^2(\gamma)} \times \sum_{l=1}^N \left(1 - \frac{l^2}{4x_0^2}\right) \left(1 - \chi\left(\frac{2x_0^2 z_{0\parallel,\perp} \sqrt{\gamma}}{x_\lambda l}\right)\right). \quad (42)$$

Отметим, что верхний предел суммирования в выражении (42) равен целому числу  $N$ , т.е. отношению волнового числа носителя заряда в самой верхней подзоне  $k_{zN}$  к волновому числу носителя заряда в первой подзоне  $k_{z1}$  [14,15]:

$$N = \frac{k_{zN}}{k_{z1}} = \left[\frac{k_F}{k_{z1}}\right] = [2x_0]. \quad (43)$$

Перейдем к случаю невырожденного электронного газа ( $u_\mu \rightarrow -\infty$ ), соответствующему низкой концентрации, большой эффективной массе носителей заряда и высокой температуре. Равновесная функция распределения переходит в классическое распределение Максвелла-Больцмана:

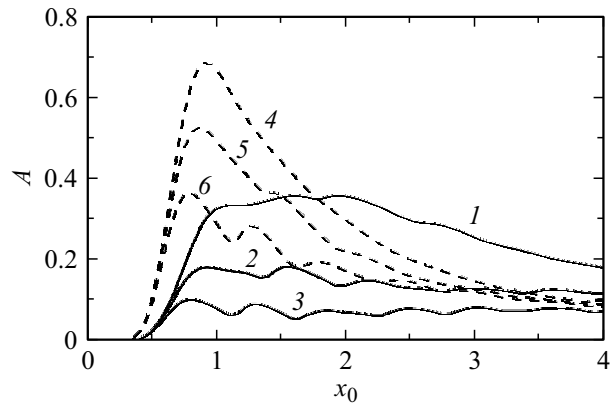
$$f_l^{(0)}(\varepsilon_l) = \exp((v - \varepsilon_l)/k_0T). \quad (44)$$

Функции  $B_{\parallel}$  и  $B_{\perp}$ , входящие в выражения (15)–(17), определяются следующим образом:

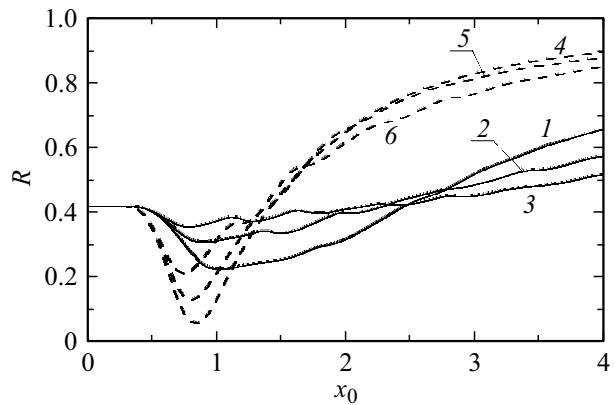
$$B_{\parallel,\perp} = \frac{\rho y_p^2}{2 \cos \theta x_\lambda z_{0\parallel,\perp} \Phi_{\parallel,\perp}^2(\gamma)} \sqrt{\frac{5}{2\pi}} \times \sum_{l=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{5l^2}{8x_0^2}\right) \left(1 - \chi\left(\frac{2x_0^2 z_{0\parallel,\perp} \sqrt{\gamma}}{x_\lambda l}\right)\right). \quad (45)$$

### Анализ результатов

На рис. 1 построены зависимости коэффициента поглощения от безразмерной толщины полупроводникового слоя. Рассмотрены случаи продольного (сплошные кривые) и поперечного (штриховые кривые) направлений оси вращения эллипсоида постоянной энергии.



**Рис. 1.** Зависимости коэффициента поглощения  $A$  от безразмерной толщины  $x_0$  при значениях  $g_1 = g_2 = 0.2$ ;  $\rho = 0.005$ ;  $y_p = 200$ ;  $x_\lambda = 8$ ;  $\varepsilon_\lambda = 7$ ;  $\varepsilon_2 = 4$ ;  $\gamma = 0.6$ ;  $\theta = 48^\circ$ . 1, 4 —  $y_0 = 10$ ; 2, 5 —  $y_0 = 17$ ; 3, 6 —  $y_0 = 25$ . Сплошные кривые 1–3 — случай продольного направления главной оси эллипсоида постоянной энергии, штриховые кривые 4–6 — случай поперечного направления.



**Рис. 2.** Зависимости коэффициента отражения  $R$  от безразмерной толщины  $x_0$  при значениях  $g_1 = g_2 = 0.2$ ;  $\rho = 0.005$ ;  $y_p = 200$ ;  $x_\lambda = 8$ ;  $\varepsilon_\lambda = 7$ ;  $\varepsilon_2 = 4$ ;  $\gamma = 0.6$ ;  $\theta = 48^\circ$ . 1, 4 —  $y_0 = 10$ ; 2, 5 —  $y_0 = 17$ ; 3, 6 —  $y_0 = 25$ . Сплошные кривые 1–3 — случай продольного направления главной оси эллипсоида постоянной энергии, штриховые кривые 4–6 — случай поперечного направления.

Расчет коэффициента поглощения производился по формуле (17) с учетом выражения для функций  $B_{\parallel}$  и  $B_{\perp}$  (45) в случае невырожденного электронного газа.

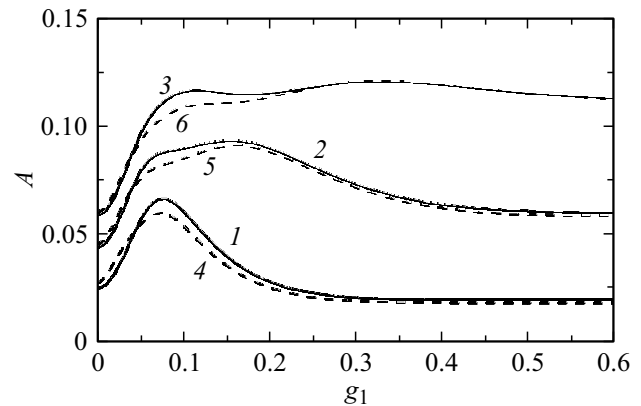
Зависимость коэффициента поглощения от толщины носит немонотонный характер. С уменьшением толщины коэффициент поглощения растет, а при  $x_0 < 1$  уменьшается. Такое поведение зависимостей можно объяснить следующим образом. При больших толщинах нанослой имеет достаточно высокую концентрацию свободных носителей заряда, оказывающих влияние на формирование вторичной отраженной волны. Практически вся энергия падающей волны переходит в отраженную. С уменьшением толщины снижается концентрация попадающих в зону проводимости свободных носителей заряда, в ре-

зультате этого часть электромагнитной волны проникает в нанослой и поглощается им, коэффициент поглощения возрастает. При дальнейшем уменьшении толщины ( $x_0 < 1$ ) концентрации свободных носителей заряда становится недостаточно для эффективного поглощения излучения, коэффициент поглощения снижается и практически равен нулю при  $x_0 < 0.5$ . Наблюдаются осцилляции зависимостей оптических коэффициентов от толщины, причина и условия возникновения которых приведены в работе [18]. На рис. 1 видно, что максимальное значение поглощения в случае продольной ориентации главной оси эллипсоида постоянной энергии является размытым и в два раза меньше максимума поглощения, рассчитанного с учетом поперечной ориентации. На размытом максимуме сплошной кривой 1 можно увидеть небольшие осцилляции в отличие от кривой 4, т.е. в случае продольной ориентации главной оси эллипсоида постоянной энергии осцилляционный эффект наблюдается при более низких частотах, чем в случае поперечной ориентации.

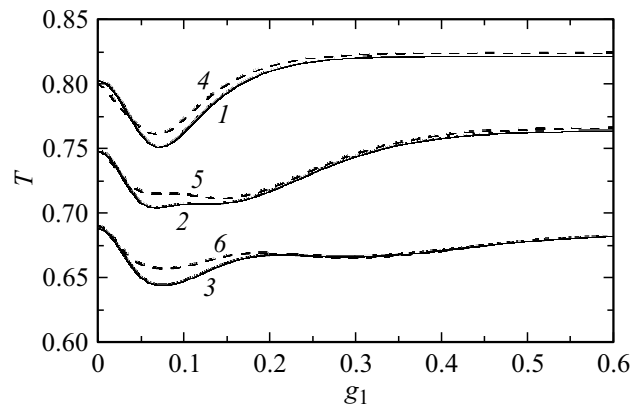
На рис. 2 изображены зависимости коэффициента отражения, рассчитанного по формуле (15) с учетом (45), от безразмерной толщины полупроводникового слоя. Из рис. 2 следует, что при некоторой толщине наблюдается минимум отражения. Возможная причина поведения зависимостей коэффициента отражения от толщины заключается в следующем. С уменьшением толщины (до  $x_0 = 0.8$ ) коэффициент отражения убывает, поскольку уменьшается концентрация формирующих отраженную волну свободных носителей заряда. При малых толщинах ( $x_0 < 0.5$ ) работает другой механизм формирования отраженной волны, аналогичный случаю диэлектрического слоя: в результате многократного отражения излучения от верхней и нижней поверхности нанослоя. Наличие небольшого количества поглощающих излучение свободных носителей препятствует формированию отраженной волны. Наблюдается уменьшение коэффициента отражения при  $0.5 < x_0 < 0.8$ .

На рис. 3 и 4 представлены зависимости коэффициентов поглощения и пропускания от параметра шероховатости верхней поверхности, построенные в случае продольного направления главной оси эллипсоида постоянной энергии. Расчет был выполнен по формулам (16) и (17) с учетом выражения для функции  $B_{||}$  (42) в случае вырожденного и (45) в случае невырожденного электронного газа. На рис. 3 и 4 при некоторых значениях шероховатости наблюдаются максимумы поглощения и минимумы пропускания. На рис. 3 и 4 видно, что кривые 1, 4 имеют один максимум поглощения (минимум пропускания), а кривые 2, 3, 5, 6 — два максимума (минимума). Возможная причина немонотонного поведения зависимостей коэффициентов поглощения и пропускания от параметра шероховатости объясняется дискретной структурой энергетических зон полупроводника.

На рис. 5 и 6 представлены зависимости коэффициента отражения, рассчитанного по формуле (15) с

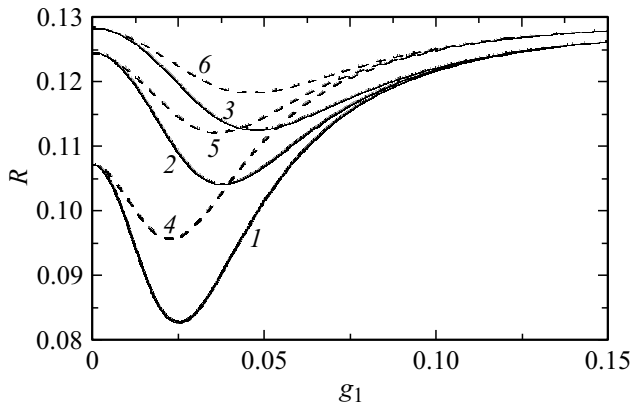


**Рис. 3.** Зависимости коэффициента поглощения  $A$  от параметра шероховатости верхней поверхности  $g_1$  при значениях  $y_0 = 4$ ;  $\rho = 0.005$ ;  $y_p = 200$ ;  $g_2 = 0$ ;  $x_\lambda = 50$ ;  $\gamma = 0.7$ ;  $\varepsilon_1 = 3$ ;  $\varepsilon_2 = 5$ ;  $\theta = 66^\circ$ : кривые 1, 4 —  $x_0 = 1$ ; 2, 5 —  $x_0 = 1.5$ ; 3, 6 —  $x_0 = 2$ . Сплошные кривые 1–3 — случай вырожденного, штриховые кривые 4–6 — невырожденного электронного газа.

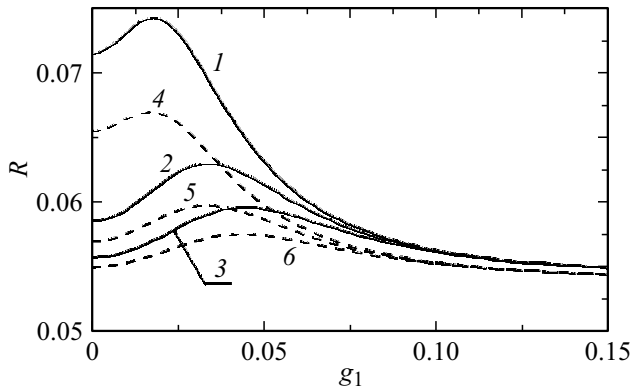


**Рис. 4.** Зависимости коэффициента пропускания  $T$  от параметра шероховатости верхней поверхности  $g_1$  при значениях  $y_0 = 4$ ;  $\rho = 0.005$ ;  $y_p = 200$ ;  $g_2 = 0$ ;  $x_\lambda = 50$ ;  $\gamma = 0.7$ ;  $\varepsilon_1 = 3$ ;  $\varepsilon_2 = 5$ ;  $\theta = 66^\circ$ : кривые 1, 4 —  $x_0 = 1$ ; 2, 5 —  $x_0 = 1.5$ ; 3, 6 —  $x_0 = 2$ . Сплошные кривые 1–3 — случай вырожденного, штриховые кривые 4–6 — невырожденного электронного газа.

учетом (42) (сплошные кривые) и (45) (штриховые кривые), от параметра шероховатости верхней поверхности. Зависимости построены в случае продольного направления главной оси эллипсоида постоянной энергии. Рис. 5 построен в случае, когда диэлектрическая проницаемость верхнего изолирующего слоя  $\varepsilon_1$  меньше диэлектрической проницаемости нижнего слоя  $\varepsilon_2$ , а рис. 6 — наоборот. На рис. 5 наблюдаются минимумы отражения, а на рис. 6 — максимумы. С увеличением частоты электромагнитной волны максимумы (минимумы) уменьшаются и смещаются в сторону больших значений шероховатости поверхности.



**Рис. 5.** Зависимости коэффициента отражения  $R$  от параметра шероховатости верхней поверхности  $g_1$  при значениях  $x_0 = 0.7$ ;  $\rho = 0.005$ ;  $y_p = 200$ ;  $g_2 = 0$ ;  $x_\lambda = 50$ ;  $\gamma = 0.7$ ;  $\varepsilon_1 = 3$ ;  $\varepsilon_2 = 6$ ;  $\theta = 37^\circ$ : кривые 1, 4 —  $y_0 = 2$ ; 2, 5 —  $y_0 = 4$ ; 3, 6 —  $y_0 = 6$ . Сплошные кривые 1–3 — случай вырожденного, штриховые кривые 4–6 — невырожденного электронного газа.



**Рис. 6.** Зависимости коэффициента отражения  $R$  от параметра шероховатости верхней поверхности  $g_1$  при значениях  $x_0 = 0.7$ ;  $\rho = 0.005$ ;  $y_p = 200$ ;  $g_2 = 0$ ;  $x_\lambda = 50$ ;  $\gamma = 0.7$ ;  $\varepsilon_1 = 6$ ;  $\varepsilon_2 = 3$ ;  $\theta = 37^\circ$ : кривые 1, 4 —  $y_0 = 2$ ; 2, 5 —  $y_0 = 4$ ; 3, 6 —  $y_0 = 6$ . Сплошные кривые 1–3 — случай вырожденного, штриховые кривые 4–6 — невырожденного электронного газа.

## Заключение

В настоящей работе в рамках квантовой теории явлений переноса получены аналитические выражения для коэффициентов отражения, пропускания и поглощения слоистой наноструктуры „диэлектрик-полупроводник-диэлектрик“ с учетом анизотропии зонной структуры полупроводника.

Установлено, что в случае поперечной ориентации главной оси эллипсоида постоянной энергии максимальное значение коэффициента поглощения практически в два раза превышает коэффициент поглощения, рассчитанный в случае продольной ориентации. В случае продольного направления оси вращения эллипсоида высокочастотные осцилляции зависимостей коэффициента поглощения от толщины полупроводникового слоя

могут наблюдаться при более низких частотах, чем в случае поперечного направления.

Обнаружено немонокотное поведение зависимостей оптических коэффициентов от параметров шероховатости границ полупроводникового нанослоя. При некоторых значениях шероховатости наблюдаются максимумы поглощения и минимумы пропускания, появление которых, возможно, связано с квантованием энергетического спектра полупроводника.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] М.К. Бахадырханов, З.Т. Кенжаев, С.В. Ковешников, К.С. Аюпов, Е.Ж. Косбергенов. ФТП, **56**(1), 128 (2022). DOI: 10.21883/FTP.2022.01.51823.9642 [M.K. Bakhadyrkhanov, Z.T. Kenzhaev, S.V. Koveshnikov, K.S. Ayupov, E.Zh. Kosbergenov. Semiconductors, **56**(1), 101 (2022). DOI: 10.21883/SC.2022.01.53028.9642].
- [2] А.С. Голтаев, А.А. Воробьев, А.М. Можаров, А.В. Павлов, Д.М. Митин, В.В. Федоров, Ю.С. Бердников, И.С. Мухин. Письма в ЖТФ, **48**(18), 6 (2022). DOI: 10.21883/PJTF.2022.18.53390.19245 [A.S. Goltayev, A.A. Vorobyov, A.M. Mozharov, A.V. Pavlov, D.M. Mitin, V.V. Fedorov, Yu.S. Berdnikov, I.S. Mukhin. Tech. Phys. Lett., **48**(9), 41 (2022). DOI: 10.21883/TPL.2022.09.55081.19245].
- [3] В.А. Небольсин, N. Swaikat, А.Ю. Воробьев, В.А. Юрьев. Письма в ЖТФ, **49**(2), 34 (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.02.54284.19285 [V.A. Nebolsin, N. Swaikat, A.Yu. Vorobev, V.A. Yuryev. Tech. Phys. Lett., **49**(1), 75 (2023). DOI: 10.21883/TPL.2023.01.55355.19285].
- [4] Е.А. Ионова, Н.Ю. Давидюк. ЖТФ, **93**(1), 122 (2023). DOI: 10.21883/JTF.2023.01.54071.160-22
- [5] Л.К. Марков, А.С. Павлюченко, И.П. Смирнова. ФТП, **55**(12), 1248 (2021). DOI: 10.21883/FTP.2021.12.51714.9712
- [6] W.B. Su, C.S. Chang, T.T. Tsong. J. Phys. D: Appl. Phys., **43**, 013001 (2010). DOI: 10.1088/0022-3727/43/1/013001
- [7] R. Villagómez, M. Xiao. Optik, **127**, 5920 (2016). DOI: 10.1016/j.ijleo.2016.04.048
- [8] В.В. Старостенко, В.Б. Орленсон, А.С. Мазинов, Л.Н. Ахрамович. Письма в ЖТФ, **46**(9), 43 (2020). DOI: 10.21883/PJTF.2020.09.49373.18242 [V.V. Starostenko, V.B. Orleson, A.S. Mazinov, L.N. Akhramovich. Tech. Phys. Lett., **46**, 450 (2020). DOI: 10.1134/S1063785020050156].
- [9] L. Sheng, D.Y. Xing, Z.D. Wang. Phys. Rev. B, **51**, 7325 (1995). DOI: 10.1103/PhysRevB.51.7325
- [10] D. Ketencoglu, B. Ünal. Physica A, **392**, 3008 (2013). DOI: 10.1016/j.physa.2013.03.007
- [11] R.C. Munoz, C. Arenas. Appl. Phys. Rev., **4**, 011102 (2017). DOI: 10.1063/1.4974032
- [12] S. Chatterjee, A.E. Meyerovich. Phys. Rev. B, **84**, 165432 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.165432
- [13] R.I. Bihun, Z.V. Stasyuk, O.A. Balitskii. Physica B: Condens. Matter, **487**, 73 (2016). DOI: 10.1016/J.PHYSB.2016.02.003
- [14] I.A. Kuznetsova, O.V. Savenko, D.N. Romanov. Phys. Lett. A, **427**, 127933 (2022). DOI: 10.1016/j.physleta.2022.127933

- [15] O.V. Savenko, I.A. Kuznetsova. Proc. SPIE, **12157**, 121570W (2022). DOI: 10.1117/12.2622544
- [16] I.A. Kuznetsova, D.N. Romanov, O.V. Savenko. Phys. Scr., **98**, 015839 (2023). DOI: 10.1088/1402-4896/acad38
- [17] S.B. Soffer. J. Appl. Phys., **38** (4), 1710 (1967). DOI: 10.1063/1.1709746
- [18] И.А. Кузнецова, О.В. Савенко. ФТП, **56** (8), 794 (2022). DOI: 10.21883/FTP.2022.08.53147.33 [I.A. Kuznetsova, O.V. Savenko. Semiconductors, **56** (8), 570 (2022). DOI: 10.21883/SC.2022.08.54116.33].
- [19] О.В. Савенко, И.А. Кузнецова. Вестник МГОУ. Серия: физика-математика, **3**, 39 (2022). DOI: 10.18384/2310-7251-2022-3-39-57
- [20] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (Наука, М., 1978).
- [21] А.В. Латышев, А.А. Юшканов. Оптический журнал, **79** (6), 3 (2012). [A.V. Latyshev, A.A. Yushkanov. J. Optical Technology, **79** (6), 316 (2012). DOI: 10.1364/JOT.79.000316].