

## Оптические процессы в хаотически наноструктурированных полупроводниках

### Optical processes in chaotically nanostructured semiconductors

Жанабаев З.Ж., Гревцева Т.Ю., Данегулова Т.Б., Манаков С.М.

*Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы (e-mail: mptl@list.ru)*

Флуктуациялық-диссипациялық теореманың кванттық формасы және заряд тасымалдаушылардың концентрациясының фракталдық эволюция теңдеуі негізінде оптикалық жұтылудың, шағылудың және өткізудің спектрлері алынған, сонымен қатар фотонның ортада оқшаулану үдерісі сипатталған. Флуктуациялар электрондардың тығыздығының таралуының тепе-теңсіз корреляциялық функциясы ретінде анықталған. Диссипация фотондардың тепе-тең таралуы арқылы берілген. Электрондардың, кемтіктердің, бөлшектер кластерлерінің концентрациясының таралуы дифференциалдық теңдеулер жүйесімен берілген. Теория оптикалық көшулердің экспериментте байқалатын фондық, экситондық, фракталдық құрылымдық механизмдерін ескереді. Босқыл, кеуекті және хаосты нанокұрылымды жартылай өткізгіштердің спектрлерін теория негізінде түсіндіруге болатындығы көрсетілген.

On the basis of the quantum form of fluctuating-dissipative theorem and equation for fractals evolution of current carrier's concentration we obtained theoretical absorption, reflection and transmission spectra, and also we described process of light localization in a medium. Fluctuations have been described by the non-equilibrium functions of density of distribution of electrons. Dissipation has been characterized by using of equilibrium distribution of photons. Distribution of concentration of electrons, holes and clusters of particles was described by the system of differential equations. Photonic and exciton mechanisms of optical transition obtained by experiments are taken into account by the theory. It was shown, that by use of the theory we can describe spectra of amorphous, porous and chaotic nanostructured semiconductors.

#### Введение

Наноструктурированные полупроводники являются перспективным материалом для целей создания быстродействующей вычислительной техники, эффективных устройств оптоэлектроники, фотоники. Главными особенностями таких материалов являются сравнимость их характерных размеров с длиной волны де Бройля и сопутствующие этому квантоворазмерные эффекты, многообразие электронных и фонных состояний, обусловленные их структурностью (пористостью и фрактальностью), локальный характер электронного поля в них. Для учета указанных особенностей в общем виде наши исследования основаны на следующих новых положениях.

Длина волны света сравнима с характерными размерами наноструктур, поэтому обычное приближение среднего эффективного поля для наших целей неприемлемо. Наноструктуры являются фрактальными объектами, и уравнения для эволюции физических величин содержат дробные размерности. Энергия возбуждения среды (сумма ширины энергетической запрещенной зоны и энергии связи экситона) считается фрактальной мерой, зависящей от энергии падающего фотона.

Коэффициенты отражения, поглощения, пропускания света определяются из системы уравнений квантовой формы флуктуационно-диссипационного соотношения и фрактальной эволюции концентрации носителей зарядов. Флуктуациям физических величин соответствуют корреляции носителей заряда, а диссипация задана равновесным распределением фотонов.

Теория описывает экспериментальные спектры фотолюминесценции квантовых точек в полупроводниках, спектры поглощения, отражения, пористого кремния, окисленного пористого кремния, пористого фосфида галлия, пористого оксида алюминия. Теория предсказывает условия локализации света в хаотически наноструктурированных средах. При этом коэффициенты поглощения, отражения света минимальные, а время пребывания фотона в среде максимальное. Различный характер зависимости оптических процессов от энергии падающего фотона учитывается фрактальностью пространства волновых чисел, т.е. непрямоzonностью энергетической щели.

#### Теоретические основы исследований

##### 1. Температурная зависимость энергетической ширины запрещенной зоны

Изменение энергетической ширины запрещенной зоны при изменении температуры связано с двумя эффектами: термическим расширением кристаллической решетки кристалла и рекомбинацией

электрона с дыркой с участием кванта теплового излучения — фонона. У большинства полупроводников значение ширины запрещенной зоны  $E_g$  уменьшается с ростом температуры [1–3].

Линейно-квадратичное эмпирическое соотношение, предложенное в [4], широко используется для описания зависимости ширины запрещенной зоны от температуры  $E_g(T)$ :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha_1 T^2}{\alpha_2 + T}, \quad (1)$$

где  $E_g(0)$  — ширина запрещенной зоны при нулевой температуре,  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — эмпирические постоянные, не имеющие конкретного физического смысла. В ряде случаев коэффициенты  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  получаются отрицательными, что вообще затрудняет физическое описание зависимости.

Следующая формула описывает изменение ширины запрещенной зоны на основе фононной статистики кристалла [5]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{A}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}, \quad (2)$$

где  $A$  — параметр, зависящий от макроскопических свойств кристалла;  $\hbar\omega$  — энергия продольных оптических фононов.

В [6] предложено, что можно учесть все эффекты, обусловленные колебанием решетки, которые влияют на уменьшение ширины щели при возрастании температуры, и можно связать их одним параметром — изменением частоты фононов. Если  $q$  — волновой вектор фонона, то суммирование проводится по всем значениям  $q$  и по всем ветвям. Таким образом, ширина запрещенной зоны изменяется с температурой по закону:

$$E_g(T) = E_g(0) - kT \sum_{q,b} \ln \left\{ \frac{\text{sh} \left[ \frac{\hbar\omega_u(q)}{2kT} \right]}{\text{sh} \left[ \frac{\hbar\omega_l(q)}{2kT} \right]} \right\}, \quad (3)$$

отсюда при высоких температурах

$$E_g(T) \approx E_g(0) - kT \sum_{q,b} \ln \frac{\omega_u(q)}{\omega_l(q)}, \quad kT > \hbar\omega(q), \quad (4)$$

где  $\omega_u(q)$  — частота в случае, когда электрон занимает верхнее состояние, а  $\omega_l(q)$  — в случае, когда он находится в нижнем состоянии. Принимается, что при возбуждении электрона атомная связь ослабевает, и возвращающая упругая сила уменьшается ( $\omega_u(q) < \omega_l(q)$ ), логарифм отрицателен, и щели уменьшаются при повышении температуры. Определение отношения частот  $\frac{\omega_l(q)}{\omega_u(q)}$  представляет отдельную задачу.

Но эксперименты показывают, что зависимость энергии возбуждения  $E_g$  от температуры  $T$  является неоднозначной и может быть как убывающей, так и возрастающей. С целью получения общего вида зависимости  $E_g(T)$  воспользуемся уравнением фрактальной эволюции концентрации электронов  $n_f$  [7]:

$$\frac{dn_f}{dT} = \frac{\Delta n_f}{(\Delta T)^{1-\gamma_0}}, \quad \Delta n_f = \left( \frac{n_f}{n_0} \right)^{\frac{1}{\gamma}}, \quad (5)$$

где  $n_0$  — равновесная (нефрактальная) концентрация электронов;  $\gamma_0, \gamma$  — дробные части фрактальных размерностей множеств значений  $T, n_f$ .

Рассмотрим случай  $\Delta T = 1$  (шаг отсчета изменения температуры). Далее все величины примем в безразмерном виде:

$$T = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}, \quad E_g = \frac{E_g - E_{g,\min}}{E_{g,\max} - E_{g,\min}},$$

а также воспользуемся формулой распределения Ферми-Дирака для  $n_0$ . С учетом фрактальности фазового объема импульсов в энергетическом представлении имеем

$$n_0(T, \varepsilon_m) = \int_0^{\varepsilon_{\max}} \frac{\varepsilon^{\frac{1+\gamma}{2}}}{e^{\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}} + 1} d\varepsilon, \quad (6)$$

где  $\gamma$  — дробная часть фрактальной размерности импульсного пространства ( $0 < \gamma < 3$ ). Для невырожденного состояния полупроводника формула (6) упрощается, и из формулы (5) получим

$$\frac{n_f}{n_{f0}} = \int_0^T \left( \int_0^{E_{g\max}} \frac{\varepsilon^{\frac{1+\gamma}{2}}}{e^{\frac{(\varepsilon-\mu)}{T}} + 1} d\varepsilon \right)^{-\frac{1}{\gamma}} dT, \quad (7)$$

где  $n_f$  — концентрация электронов в фрактальном кластере;  $n_{f0}$  — концентрация электронов при фиксированной температуре  $T_0$ .

## 2. Зависимость энергии возбуждения электрона в наноструктурированном полупроводнике от энергии падающего фотона

Энергия связанного состояния электрона и дырки — экситона соответствует выражению

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*} + E_g + E_{exc} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*} + E_g - \frac{e^4 m_r^*}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon^2 \varepsilon_0^2 n^2} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*} + E_g(\omega, \gamma), \quad (8)$$

$$M^* = m_n^* + m_p^*, \quad m_r^* = \frac{m_n^* m_p^*}{m_n^* + m_p^*}, \quad (9)$$

где  $M^*$  и  $m_r^*$  — эффективная и приведенная массы экситона;  $E_g(\omega, \gamma)$  — энергия возбуждения электрона (алгебраическая сумма энергетической ширины запрещенной зоны  $E_g$  и энергии экситона), которая зависит от частоты фотона и фрактальной размерности пространства импульсов. Мы считаем, что  $E_g(\omega, \gamma)$  является фрактальной мерой, зависящей от масштаба измерения самой величины. В качестве относительных масштабов измерения выберем

$$\delta_1 = \frac{\hbar\omega - E_g(\omega, \gamma)}{\hbar\omega}, \quad \delta_2 = \frac{\hbar\omega - E_g(\omega, \gamma)}{E_g(\omega, \gamma)}. \quad (10)$$

После этого из определения фрактальной меры имеем следующие нелинейные уравнения для определения  $E_g(\omega, \gamma)$ :

$$E_g(\omega, \gamma) = E_{g0} \left( \left| 1 - \frac{E_g(\omega, \gamma)}{\hbar\omega} \right|^{-\gamma} \right), \quad E_g(\omega, \gamma) = E_{g0} \left( \left| 1 - \frac{\hbar\omega}{E_g(\omega, \gamma)} \right|^{-\gamma} \right), \quad (11)$$

где  $E_{g0}$  — значение ширины запрещенной зоны при  $\gamma = 0$ . Первая формула соответствует выбору масштаба измерения фрактальной меры относительно  $\hbar\omega$ , вторая — относительно  $E_g(\omega, \gamma)$ .  $E_{g0}, \gamma$  определяют тип нанопленок.

## 3. Флуктуационно-диссипационное соотношение для поглощения фотонов

Рассмотрим процессы взаимодействия фотонов и фононов, экситонов, образуемых в наноструктурированных полупроводниках. Равновесное распределение фотонов по температуре определяет процесс диссипации энергии. Спектр мощности пространственных корреляций электронов можно сопоставить с энергией фононов, т.е. флуктуациями энергии. Пространственные и частотные спектры мощности можно связать через условия образования экситона. Тогда из квантовой формы универсального флуктуационно-диссипационного соотношения для коэффициента поглощения фотона  $\alpha(\omega, E_g)$  получим формулу [8]

$$\alpha(\omega, E_g) = \alpha_0(E_g) \frac{1}{\hbar\omega - E_p} th \frac{(\hbar\omega - E_p)}{2kT} E_e(k) (\hbar\omega - E_g)^{\frac{1+\gamma}{2}}, \quad (12)$$

где  $\alpha_0(E_g)$  — размерная постоянная, заданная для края поглощения;  $E_p$  — энергия оптических фононов;  $E_e(k)$  — спектр мощности колебаний электронов, зависящий от волнового числа;  $E_g$  — энергетическая ширина запрещенной зоны. Предельные значения  $\gamma = 0$ ,  $\gamma = 3$  описывают известные экситонные механизмы оптического поглощения в прямозонных и непрямозонных полупроводниках.

Неоднородное, перемежаемое пространственное распределение электронов, дырок и примесей (дефектов различного типа) в наноструктурированных полупроводниковых тонких пленках можно описать при помощи системы нелинейных дифференциальных уравнений, имеющей вид [7]

$$\frac{dn_j(x)}{dx} = \text{sign}(\psi_n) |\psi_n(n, x)|^2 (|x - x_*|)^{\gamma_0} \left( \frac{n_j(x)}{n_0} \right)^{\frac{1}{\gamma}}, \quad (13)$$

где  $j = (e, p, a)$ ,  $n = (n_e, n_p, n_a)$  — концентрации квазичастиц — электронов, дырок и кластеров (дефектов различных типов) — в полупроводнике;  $\psi_n = (\psi_e, \psi_p, \psi_a)$  — соответствующие волновые функции;  $x_*$  — координата центра кластера;  $n_0 = (n_{0e}, n_{0p}, n_{0a})$  — равновесные концентрации электронов, дырок и примесей. Параметры  $\gamma = (\gamma_e, \gamma_p, \gamma_a)$ ,  $\gamma_0$  являются фрактальными размерностями случайных множеств значений соответствующих переменных в самоаффинных ( $1 - I_1 \leq \gamma_n < 1 - I_{20}$ ) и самоподобных ( $1 - I_{20} \leq \gamma_n < 1 - I_2$ ) случаях. Числа  $I_1 = 0,567$ ,  $I_2 = 0,806$  определяют неподвижные точки плотности вероятности информации и информационной энтропии,  $I_{20} = 0,618$  (число Фибоначчи) является минимальным значением, соответствующим приближенному описанию самоподобия (переходу к самоаффинности) [9]. Фрактальные размерности геометрических мер определяются как  $D = d + \gamma$ , где  $d = (0, 1, 2, 3)$  — топологическая размерность.

В приближении сильной связи между электронами и кластерами можно построить волновые функции ( $\psi(n, x)$ ), центрированные на узлах кластеров  $\vec{R}$ , т.е. записать через функции Ванье  $\varphi(\vec{r} - \vec{R})$ :

$$\psi_n(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \varphi_n(\vec{r} - \vec{R}) \exp(i\vec{k}\vec{R}). \quad (14)$$

Можно принять аппроксимацию функции Ванье в виде атомных орбиталей.

Для низкоразмерных наноструктур вид  $\psi_n(x)$  легко находится из уравнения Шредингера. В случае слабой связи электрона с кластером может быть использовано приближение плоских волн:

$$\psi_n(x) = \psi_p(x) = \psi_a(x) = \psi_0 \cos(k_n x) \cos(k_p x) \cos(k_a x). \quad (15)$$

Для описания структурных (фрактальных) свойств явления мы воспользуемся дискретной формой системы (13), принимая показатель Липшица-Гельдера ограничения производной в виде, удовлетворяющем условию обобщенного броуновского движения  $\Delta n_i \Delta x_i^{\gamma_0} = 1$ ,  $\frac{1}{2} < \gamma_0 < 1$ :

$$n_{i+1} = (n_i + \text{sign}(\psi_i) |\psi_i(n_i, x_i)|^2) \left( \frac{n_i(x_i)}{n_0} \right)^{\frac{1}{\gamma}}. \quad (16)$$

Используя выражения для волновой функции, можем определить пространственные корреляции плотности электронов  $C_{e,e}(m)$  и соответствующие спектры мощности  $E_e(k)$ :

$$C_{e,e}(m) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N n_{e,i+m} n_{e,i}, \quad E_e(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=0}^N \cos(2\pi mk) C_{e,e}(m). \quad (17)$$

#### 4. Связь процессов поглощения, отражения и пропускания фотонов

Теорию оптического поглощения можно использовать для описания явления отражения фотонов. Согласно квантовым представлениям явление отражения можно рассматривать как переизлучение фотона. При этом необходимо учесть зависимость свойств среды от энергии падающего фотона. Мы учтем зависимость энергии возбуждения полупроводниковой пленки  $E_g(\omega, \gamma)$  (сумма ширины

энергетической запрещенной зоны и энергии связи экситона) от энергии фотона. Тогда имеем следующую формулу для коэффициента отражения:

$$R(\omega, E_g(\omega, \gamma)) = R_0 \frac{1}{\hbar\omega - E_p} th \frac{(\hbar\omega - E_p)}{2kT} E_{n(s)}(k) (\hbar\omega - E_g(\omega, \gamma))^{1+\gamma}, \quad (18)$$

где энергия возбуждения среды  $E_g(\omega, \gamma)$  считается фрактальной мерой, зависящей от энергии падающего фотона. Предельные значения  $\gamma = 0, \gamma = 3$  соответствуют прямозонным и непрямозонным полупроводникам.

Зная коэффициенты поглощения ( $\alpha(\omega)$ ) и отражения ( $R(\omega)$ ), можем определить коэффициент пропускания ( $T(\omega)$ ) для одного слоя тонкой пленки:

$$\alpha_1(\hbar\omega) + R_1(\hbar\omega) + T_1(\hbar\omega) = 1 \quad (19)$$

при соответствующем выборе  $\alpha_{\max}(\omega_0), R_{\max}(\omega_0), T_{\max}(\omega_0)$  для  $\omega = \omega_0$ .

Введем индекс  $i$  — номер слоя. Формулу (19) запишем для слоя  $i = 2$ :

$$\alpha_2(T_1\hbar\omega) + R_2(T_1\hbar\omega) + T_2(\hbar\omega) = 1. \quad (20)$$

Для произвольного слоя

$$\begin{cases} \alpha_{i+1}(T_i\hbar\omega) + R_{i+1}(T_i\hbar\omega) + T_{i+1}(\hbar\omega) = 1 \\ R_{i+1} = 0, \quad i \geq 1, \quad T_0 = 1 \end{cases} \quad (21)$$

### 5. Задержка фотонов по времени в наноструктурированном полупроводнике

Убывание по времени числа фотонов  $n_\omega$  в объеме пропорционально коэффициенту поглощения  $\alpha(\hbar\omega)$  и скорости фотона  $v_\omega$ :

$$\frac{dn_\omega}{dt} = -\alpha(\hbar\omega)n_\omega v_\omega. \quad (22)$$

Отсюда найдем время задержки фотона  $\tau$  в среде и запишем соответствующее выражение для интенсивности поглощаемой энергии  $I$ :

$$\tau = - \int_{n(T_0)}^{n(T)} \frac{dn_\omega}{n_\omega \alpha(\hbar\omega) v_\omega} \approx - \frac{1}{\alpha(\hbar\omega)} \int_{n(T_0)}^{n(T)} \frac{dn_\omega}{n_\omega v_\omega}, \quad (23)$$

$$I = n_\omega \hbar\omega = n_0 \left\{ cth \left( \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \right\} \hbar\omega, \quad (24)$$

где  $n_\omega$  — число фотонов;  $\alpha(\hbar\omega)$  — коэффициент поглощения, слабо зависящий от концентрации в пределах от  $n(T_0)$  до  $n(T)$ ;  $\tau$  — время задержки фотона внутри наноструктурированного полупроводника. Из этих двух уравнений найдем зависимость  $I(\tau)$ .

#### Результаты численного анализа

Как правило, температурная зависимость ширины запрещенной зоны  $E_g$  полупроводников имеет убывающий характер, но для некоторых веществ наблюдается увеличение ширины запрещенной зоны с ростом температуры. Так, на рисунке 1 показана возрастающая теоретическая зависимость  $E_g(T)$ , полученная численным анализом формулы (7) (кривая 1). Этой кривой соответствует экспериментальная зависимость от температуры ширины щели  $E_g$  аморфного гидрогенизированного кремния ( $\alpha$ -Si:H) с минимальной концентрацией водорода (около 0%), полученного при температуре осаждения 0 °C (кривая 2) [10]. На рисунке приведена зависимость ширины запрещенной зоны твердого раствора  $Pb_{0,82}Sn_{0,82}Te$  (кривая 3), которая тоже возрастает с температурой в определенном интервале, зависящем от величины концентрации дырок [11]. Температурная зависимость этого эффекта объяснялась моделью зон легких и тяжелых дырок. На этом же рисунке показано влияние температуры отжига на величину оптической ширины запрещенной зоны (кривая 4). Отжиг при 800 °C безводородных пленок  $\alpha$ -Si, изготовленных при 200 °C, приводил к монотонному возрастанию  $E_g$  в интервале от 1,48 до 1,8 эВ. Здесь увеличение  $E_g$  происходит не вследствие окисления, поскольку окисление

пленки в процессе отжига привело бы к уменьшению коэффициента преломления. В структуре аморфного кремния наряду с сильно связанной основной подрешеткой образуются слабо связанная подрешетка дефектов и микропоры. Именно последние факторы приводят к росту  $E_g(T)$  [12].

На рисунке 1b показаны теоретические (кривые 1, 2) и экспериментальные (кривые 3, 4) зависимости изменения ширины щели  $E_g$  от температуры. Кривые 1, 2 получены численным анализом формулы (7). Кривая 3 представляет собой экспериментальную температурную зависимость  $E_g$  для образца  $\alpha$ -Si:H, полученного методом магнетронного распыления [10]. Также на рисунке приведены результаты изменения оптической ширины запрещенной зоны монокристаллов тройного полупроводникового соединения  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$  (кривая 4), которые были выращены направленной кристаллизацией расплава в вакуумированных двойных кварцевых ампулах [13]. Условия эксперимента обеспечивают более упорядоченную структуру с малой размерностью, что соответствует выводу теории об убывании  $E_g(T)$  при малых  $\gamma$ .

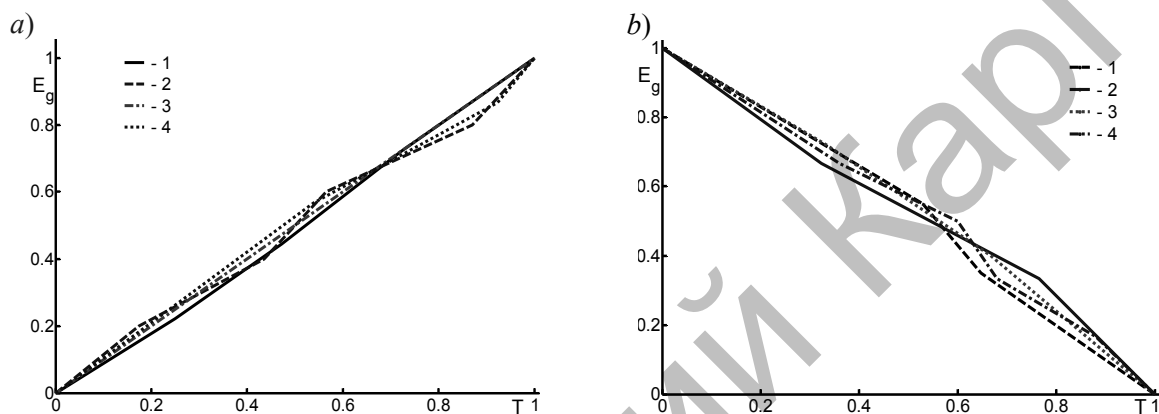


Рис. 1. Зависимость ширины щели от температуры: а) 1, 2 — результаты формулы (7):  $n = 0,9$ , 1 —  $\gamma = 0,194$ ; 2 —  $\gamma = 2,433$ ; эксперимент: 3 — твердый раствор  $\text{Pb}_{0,82}\text{Sn}_{0,82}\text{Te}$ ; 4 — ( $\alpha$ -Si) влияние температуры отжига; б) 1, 2 — результаты формулы (7):  $n = 0,194$ , 1 —  $\gamma = 0,01$ ; 2 —  $\gamma = 0,05$ ; эксперимент: 3 — монокристалл тройного соединения  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$ ; 4 —  $\alpha$ -Si:H при концентрации водорода 40 %

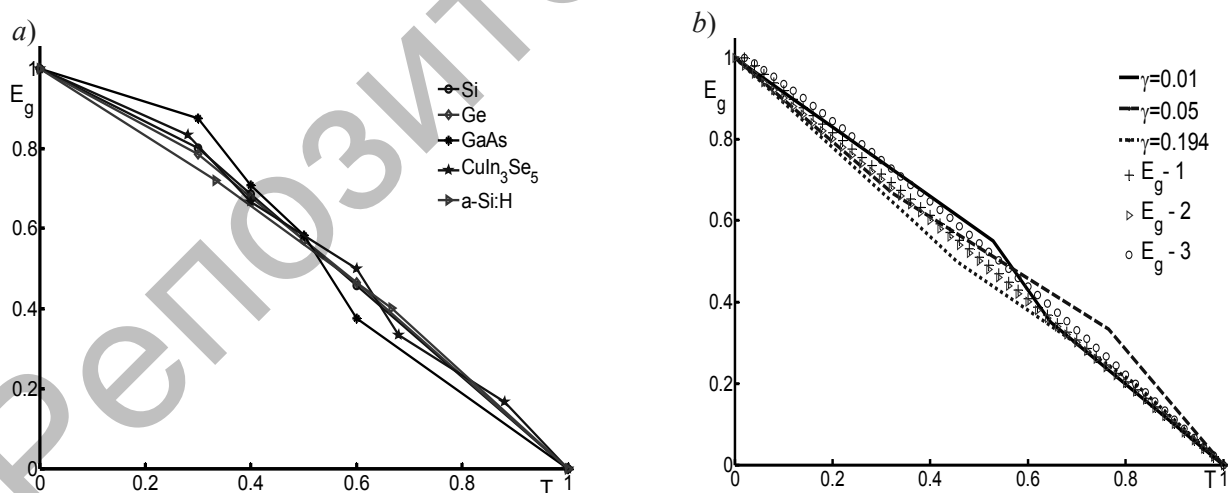


Рис. 2. Экспериментальные и теоретические зависимости ширины щели от температуры: а — экспериментальные данные полупроводников Ge, Si, GaAs, монокристалла тройного соединения  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$  и аморфного гидрогенизированного кремния ( $\alpha$ -Si:H) при концентрации водорода 40 %; б — известные формулы: 1 — (1), 2 — (2), 3 — (4) и результаты формулы (7) при  $n = 0,194$

Показанные на рисунке 2a экспериментальные данные по  $E_g(T)$  для таких полупроводников, как кремний, германий, арсенид галлия,  $\alpha$ -Si:H при разных концентрациях водорода [10] тоже подтверждают этот вывод (рис. 2b).

На рисунке 3 показаны численные результаты энергии возбуждения среды  $E_g(\omega, \gamma)$ , которые описываются уравнениями (11). При малых значениях фрактальной размерности  $0 < \gamma < 1$  функция  $E_g(\omega, \gamma)$  больше нуля, если фрактальная размерность принимает большие значения, т.е.  $1 < \gamma < 3 + 1 - I_1$ , то функция может принимать и отрицательные значения. Этот случай соответствует тому, что экситон существует в основном состоянии полупроводника, т.е. при отсутствии внешнего электромагнитного поля. Различный характер отдельного оптического спектра учитывается фрактальностью пространства волновых чисел, т.е. непрямоzonностью энергетической щели.

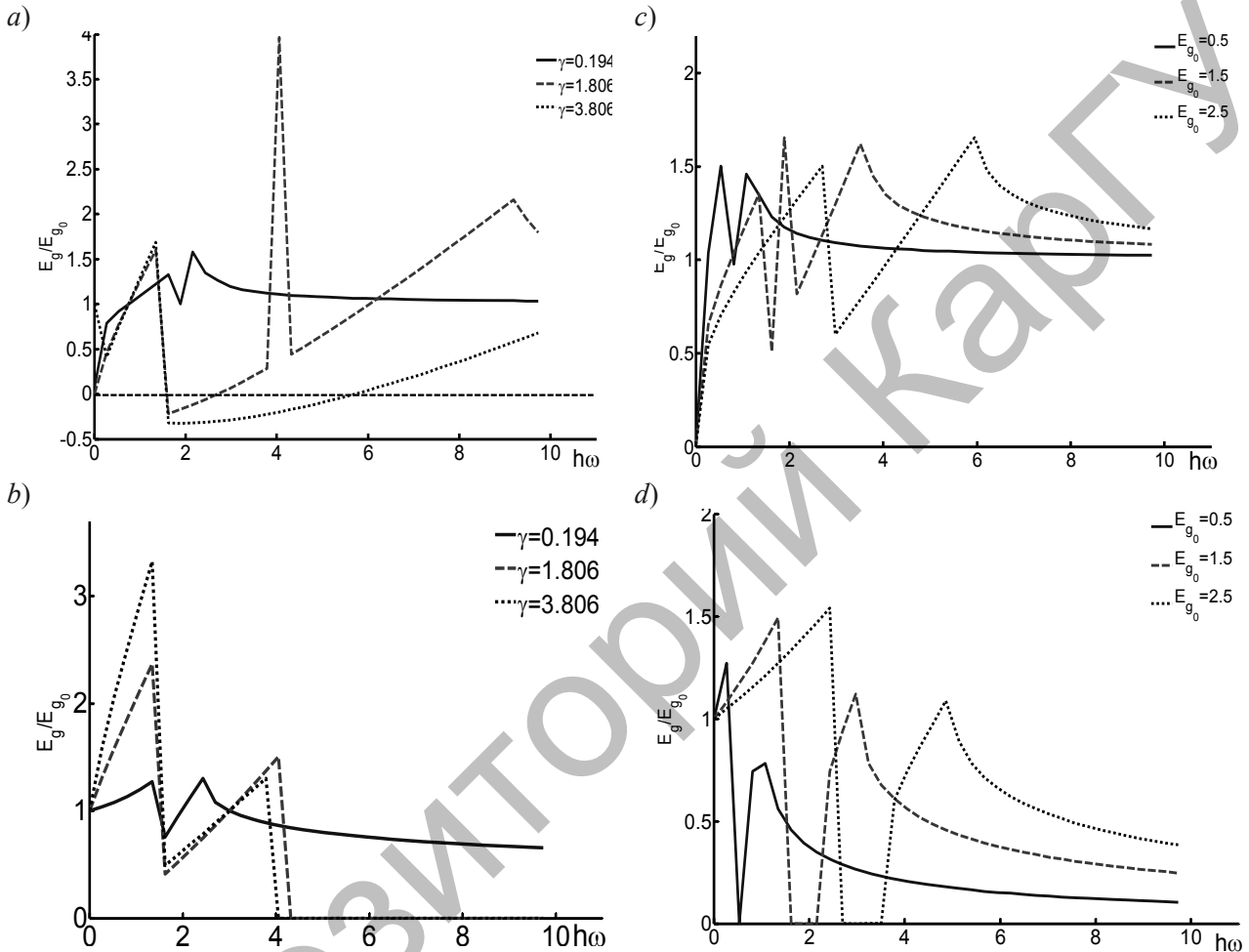


Рис. 3. Зависимость энергии возбуждения  $E_g(\omega, \gamma)$  от энергии падающих фотонов  $\hbar\omega$ : *a, b* — влияние фрактальной размерности  $\gamma$  при  $E_{g_0} = 1,5$  эВ; *c, d* — влияние значения ширины запрещенной зоны  $E_{g_0}$  при  $\gamma = 0,433$

Для иллюстрации возможностей теории на рисунке 4*a* показаны спектры поглощения матрично-изолированных молекул  $C_{60}Cl_{24}$  (кривая 1) и кристаллического порошка  $C_{60}Cl_{24}$  (кривая 2) в матрице хлорбензола [14]. Как показал эксперимент, люминесценция  $C_{60}Cl_{24}$  чрезвычайно слаба, что указывает на значительную роль безызлучательных процессов. На рисунке 4*b* приведен соответствующий результат спектра поглощения численного анализа. Согласно теоретическим результатам следует, что доля безызлучательных процессов при излучении матрично-изолированных молекул  $C_{60}Cl_{24}$  меньше, чем при излучении кристаллического  $C_{60}Cl_{24}$  порошка. Теоретические результаты были получены по формуле (12).

На рисунке 5*a, b* приведены спектры отражения фотонно-кристаллической структуры на основе пористого кремния [15], а на рисунке 5*c, d* показаны спектры отражения, которые были получены численным анализом уравнений (18), (21).

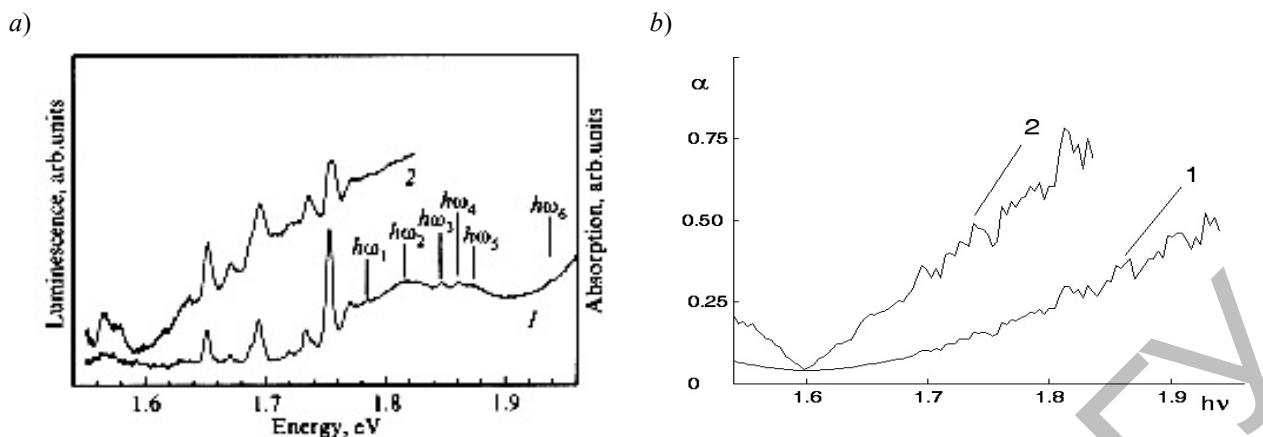


Рис. 4. Спектр поглощения галогенофуллерепа  $C_{60}Cl_{24}$ : *a* — эксперимент; *b* — теория:  $E_g = 1,6$  эВ,  $kT = 0,1$  эВ,  $n_0 = p_0 = a_0 = 1$ ,  $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_2$ ,  $n_1 = p_1 = a_1 = 1$ ; 1 —  $E_p = 1,6$  эВ; 2 —  $E_p = 1,2$  эВ

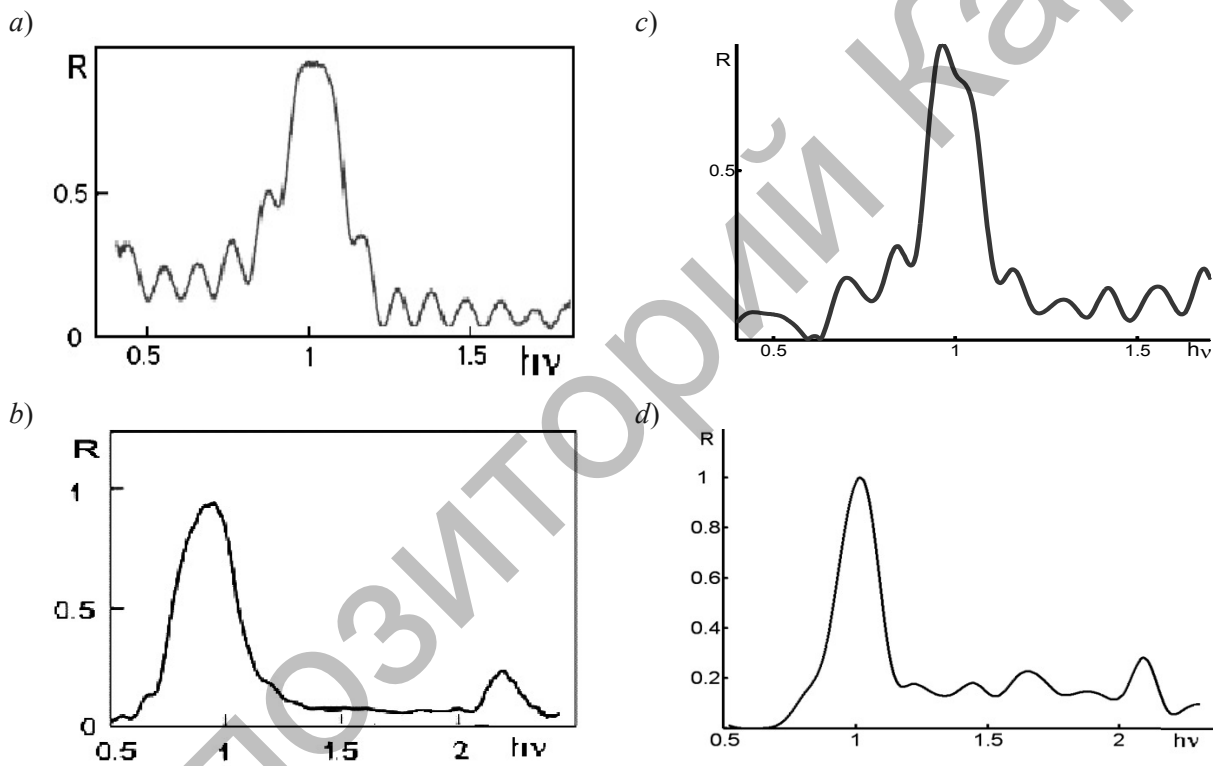


Рис. 5. Спектры отражения многослойной структуры на основе пористого кремния: *a*, *b* — экспериментальный спектр отражения многослойной структуры на основе пористого кремния,  $kT = 0,025$  эВ,  $E_p = 1,5$  эВ,  $n_0 = p_0 = a_0 = 1$ ,  $\gamma = 0,567$ ,  $n_1 = p_1 = a_1 = 1$ ,  $k_n = 20$ ;  $k_p = k_n = 1$ ; *c*, *d* — теория: *c* —  $E_{g_0} = 0,5$  эВ,  $N = 37$ ; *d* —  $E_{g_0} = 1,5$  эВ,  $N = 35$

Мы можем, таким образом, учесть каждый слой, чтобы описать спектры отражения многослойной структуры на основе пористого кремния.

На рисунке 6*a–d* приведены экспериментально полученные спектры экситонного поглощения. На рисунке 6*a* показан экспериментально полученный набор слабо разрешенных экситонных пиков поглощения в  $Cu_2O$  [16] (видна так называемая желтая экситонная серия 2*p*, 3*p*, 4*p* и т.д.). Экситонные линии в спектре поглощения образца GaN, полученного при температуре 77 К, показаны на рисунке 6*b* [17]. Авторы работы считают, что наблюдаемые пики могут быть обусловлены экситонным характером поглощения при участии фононов. На рисунке 6*c* приведен экспериментальный график, характеризующий поглощение в образце Si:Be [18]. Как отмечают авторы работы, наличие четырех

пиков в спектре свидетельствует об экситонном характере поглощения, причем изменение температуры образца существенно влияет на высоту пиков. На рисунке 6d показан спектр оптического поглощения квантовых точек образца InGaAs/GaAs при участии фононов [19].

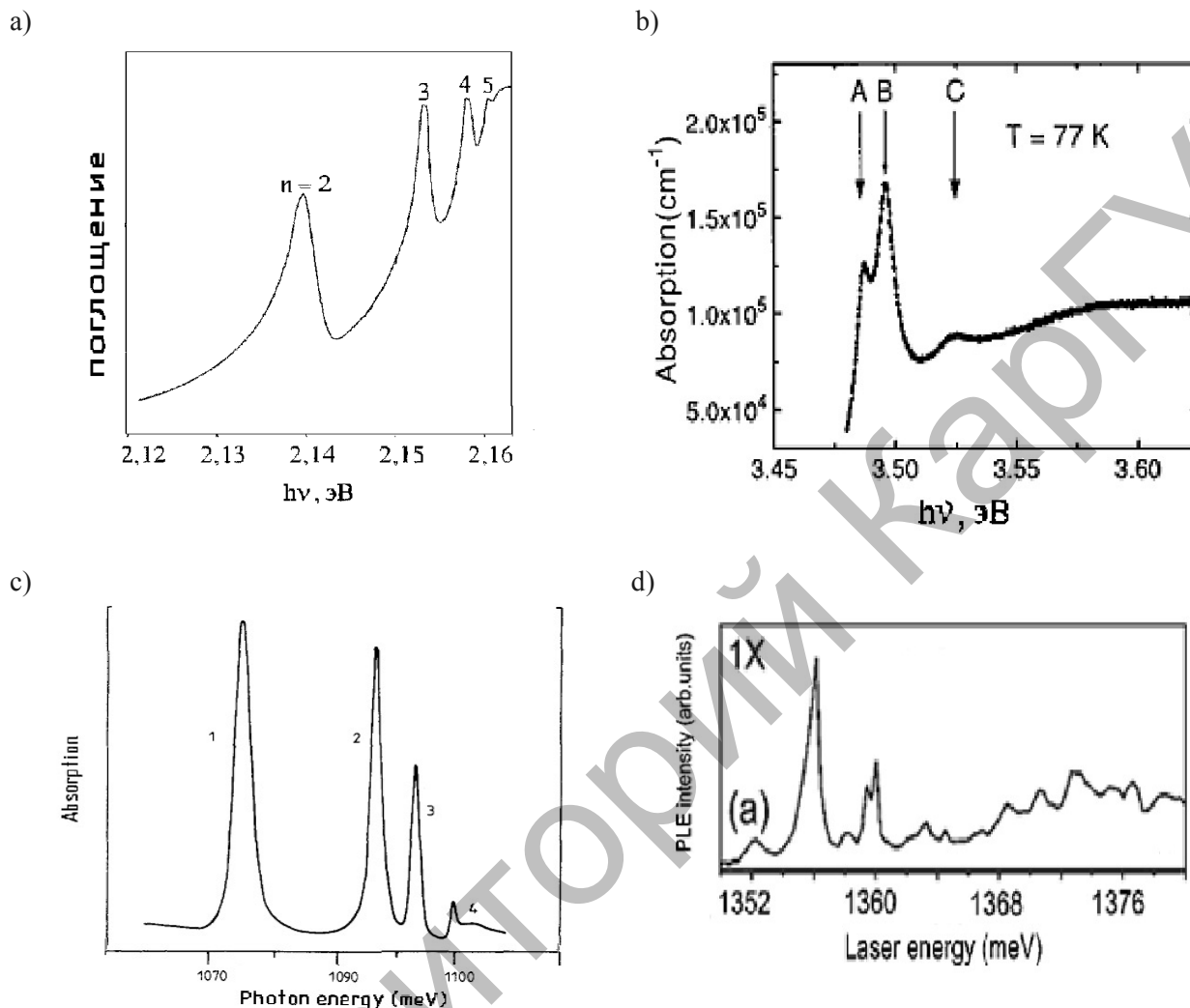


Рис. 6. Спектры поглощения: *a* —  $\text{Cu}_2\text{O}$  [16]; *b* — GaN [17]; *c* — Si:Be [18]; *d* — InGaAs/GaAs [19]

На рисунке 7 приведены спектры поглощения, полученные численным анализом формул (12), (13), где энергия возбуждения описывается формулой (11). Как следует из рисунка 7*a, b*, различным значениям параметров  $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ , характеризующим тип наноструктур (точечные, линейчатые, поверхностные, объемные), соответствуют различные типы спектров поглощения. Экситонные линии сильнее проявляются при малых  $\gamma_n, \gamma_p, \gamma_a$ , т.е. при поглощении точечными структурами, что наблюдается в эксперименте [18]. На экситонных спектрах поглощения (рис. 7*c-f*) наблюдаются осцилляции в интервалах энергии фотонов порядка 0,01 эВ, как и в приведенных выше экспериментальных спектрах [16–19]. Амплитуда пиков экситонного спектра в этих интервалах варьируется примерно в 3 раза, что также согласуется с экспериментом.

Если нормировать фазу кривых, то следует ожидать, что теория в целом удовлетворительно описывает хаотические, фрактальные закономерности экситонного спектра. Именно учет фрактальности наноструктур дает картину, близкую к экспериментальной.

На рисунке 8 приведена зависимость интенсивности поглощаемой энергии от времени задержки  $\tau$  фотона внутри наноструктурированного полупроводника. Наличие осцилляций интенсивности подтверждается экспериментом [15].

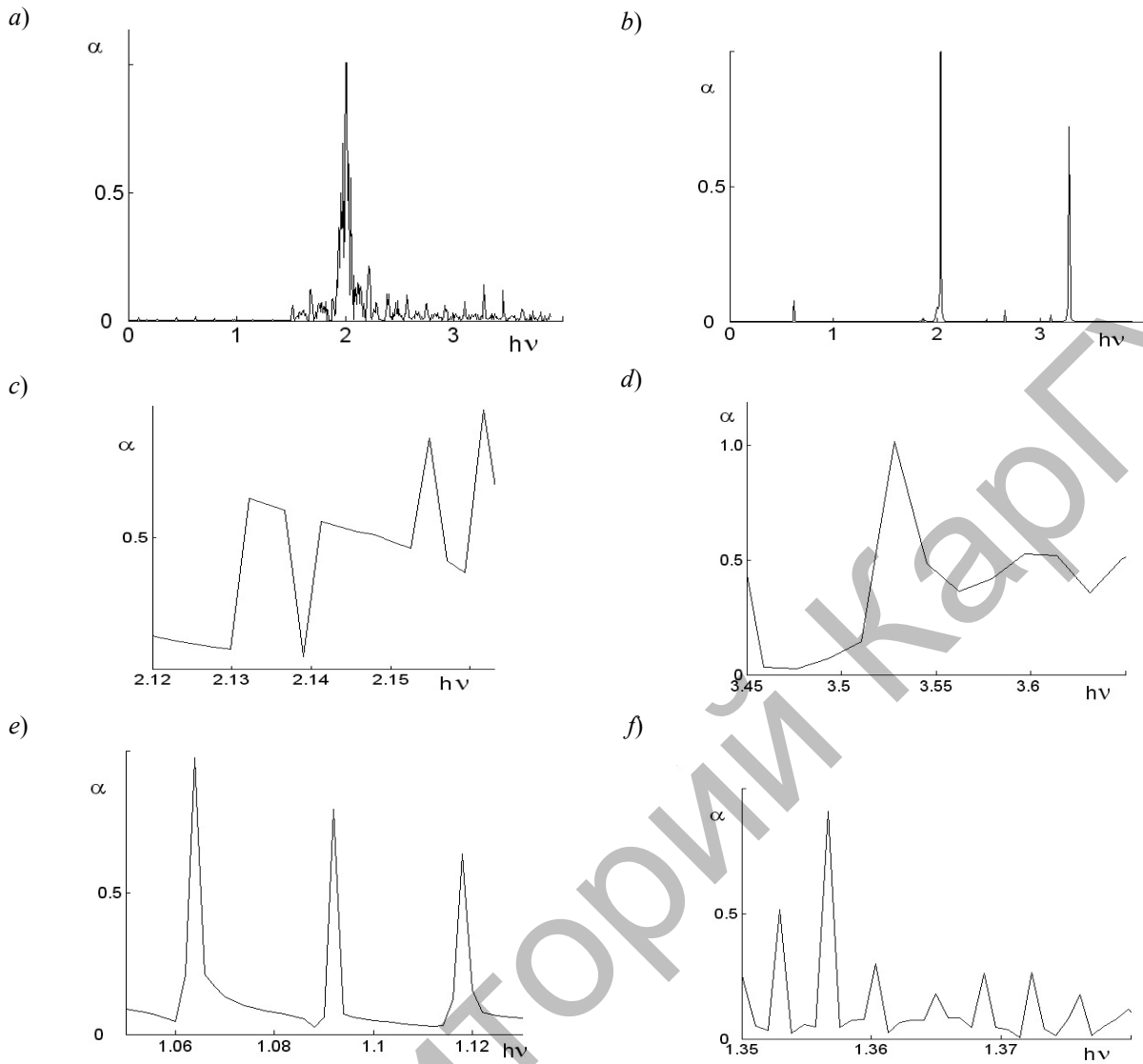


Рис. 7. Теоретические спектры экситонного поглощения:  $\gamma = I_2$ ,  $kT = 0,005$  эВ,  $E_{g_0} = 1,5$  эВ: *a* —  $\gamma_n = \gamma_p = \gamma_a = I_1$ ; *b* —  $\gamma_n = 3 + I_1$ ; *c* —  $E_{g_0} = 1,8$  эВ,  $kT = 0,0025$  эВ,  $\gamma_n = I_1$ ; *d* —  $E_{g_0} = 3,0$  эВ,  $kT = 0,006$  эВ,  $\gamma_n = I_1$ ; *e* —  $E_{g_0} = 1,5$  эВ,  $kT = 0,007$  эВ,  $\gamma_n = I_1$ ; *f* —  $E_{g_0} = 1,5$  эВ,  $kT = 0,007$  эВ,  $\gamma_n = I_2$

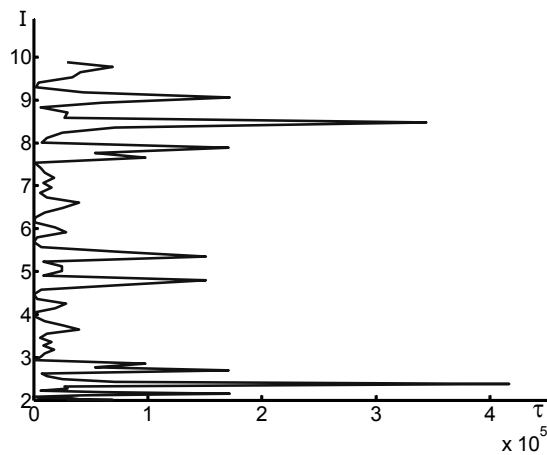


Рис. 8. Изменение интенсивности поглощения  $I$  по времени

На рисунке 9а показаны экспериментальные данные по сравнению времени задержки фотона внутри кристаллического и пористого фосфида галлия GaP [20]. Экспериментальный график сопоставлен с результатами численного анализа формул (23) и (24) (рис. 9б). Мы используем среднее по частоте значение интенсивности  $\langle I \rangle$  поглощения фотона. Теоретические кривые различаются значениями фрактальной размерности (т.е. типом структур) и числом фотонов. Теоретические и экспериментальные данные качественно соответствуют друг другу.

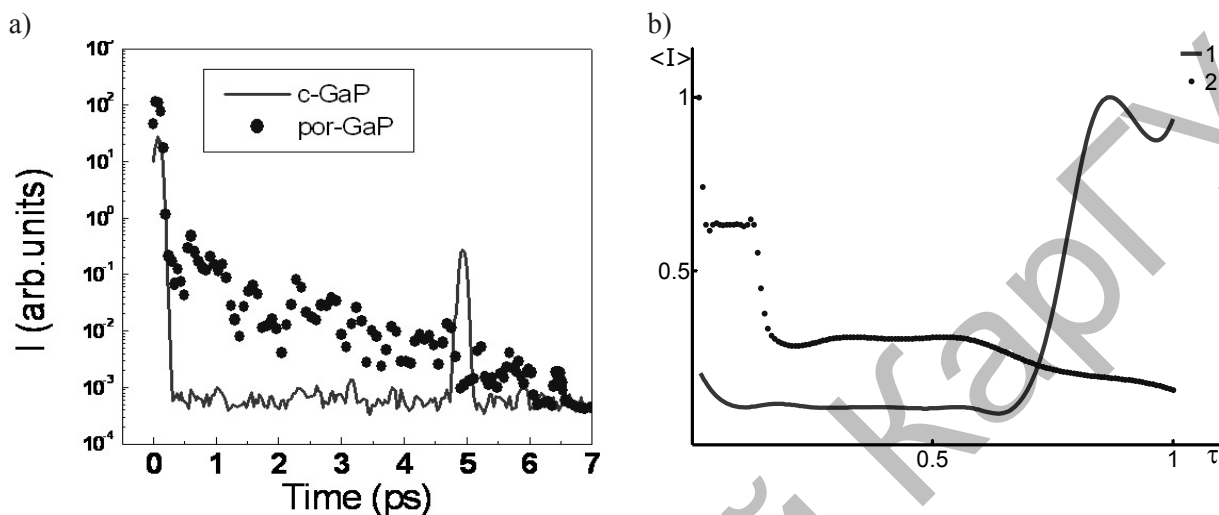


Рис. 9. Интенсивность поглощения фотона: а — экспериментальные данные c-GaP и por-GaP; б —  $kT = 0,025$  эВ,  $E_p = 1,5$  эВ,  $E_{g_0} = 1,5$  эВ,  $\gamma = 0,194$ ,  $n_1 = p_1 = a_1 = 1$ ,  $k_n = 20$ ;  $k_p = 10$ ;  $k_n = 1$ ;  $\hbar\omega = 10$  эВ:  
1 —  $n_\omega = 85$ ;  $\gamma = 0,194$ ; 2 —  $n_\omega = 200$ ;  $\gamma = 2,433$

#### Заключение

Теория описывает экспериментальные спектры поглощения, отражения, пропускания и непрозрачность оптических процессов наноструктурированных полупроводников на основе предложенной в работе системы уравнений фрактальной эволюции концентраций и квантовой формы флуктуационно-диссипационного соотношения, нелинейной зависимости энергетической ширины запрещенной зоны от энергии фотонов. Показано, что предлагаемая теория описывает экситонные спектры аморфных, пористых, хаотических наноструктур, а также предсказаны механизмы, при наличии которых время локализации света в среде максимальное.

Результаты настоящей работы могут быть использованы для повышения эффективности солнечных батарей, элементов быстродействующей вычислительной техники.

#### References

1. Wilson A.H. The Theory of Metals. — Cambridge, 1953.
2. Peiers R.E. Quantum Theory of Solids. — Oxford, 1953.
3. Nikiforova C. The temperature in the life and work of LEDs. Part 1 // Components and technology. — 2005. — №. 9. — P. 140–146.
4. Varshni Y.P. Temperature dependence of the energy gap in semiconductor // Physics. — 1967. — №. 34— P. 149–154.
5. Fan H.Y. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors // Physics Review B. — 1951. — №. 82. — P. 900–905.
6. Ridley B. Quantum processes in semiconductors. — M.: World, 1986. — Vol. 1. — P. 44–47.
7. Zhanabayev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Fractal Properties of nanostructured semiconductors // Physics B: Condensed Matter. — 2007. — Vol. 391. — №. 1. — P. 12–17.
8. Zhanabayev Z.Zh. Optical properties of nanostructured semiconductors // Herald of KNU. Ser. nat. — 2007. — №. 2. — P. 83–88.
9. Zhanabayev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Fractality of nanostructured semiconductor films // e-Journal of Surface Science and Nanotechnology. — 2007. — Vol. 5. — P. 132–135.
10. Svanbaev E.A., Taurbaev T.I., Zhdanovich N.S., Zherzdnev A.V., Terukov E.I. Physical properties of amorphous hydrogenated silicon obtained by magnetron sputtering // News of Akad., Inorganic Materials. — 1987. — Vol. 23. — №. 5. — P. 709–713.

11. Sizov F.F., Eagle V.V., Grineva S.G., Tovstyuk K.D. Optical and thermal band gap of the solid solution // Ukrainian Journal of Physics. — 1974. — Vol. 19. — № 12. — P. 1979–1984.
12. Danegulova T.B., Svanbaev E.A., Kemerbaeva B.T. Effect of annealing on the optical properties of amorphous silicon // Proceedings of III International Conference «Amorphous and microcrystalline semiconductors». Russia. — St. Petersburg, 2002. — P. 43.
13. Bodnar I.V. Investigation of single ternary compound // Semiconductors. — 2008. — Vol. 42. — № 9. — P. 1046–1049.
14. Razbirin B.S., Starukhin A.N. et. al. Line spectrum absorption halogenofulleren C<sub>60</sub>Cl<sub>24</sub> // Solid State Physics. — 2002. — Vol. 44. — № 11. — P. 2106–2111.
15. Golovan L.A., Timoshenko V.Yu., Kashkarov P.K. Optical properties of nanocomposites based on porous systems // Usp. — 2007. — Vol. 177. — № 6. — P. 619–638.
16. Cardona M. Fundamentals of Semiconductors. — M.: Phys-math.lit., 2002. — 560 p.
17. Muth J.F., Lee J.H., Shmagin I.K., Kolbas R.M. Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements // Applied Physics Letters. — 1997. — Iss. 71 (18). — P. 2572–2574.
18. Henry M.O., Monoley K.A., Treacy J., Mulligan F.J., Lightowers. Uniaxial stress studied of the Be pair exciton absorption spectrum in silicon // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1984. — Vol. 17. — P. 6245–6251.
19. Findeis F., Zrenner A., Böhm G., Abstreiter G. Phonon-assisted biexciton generation in a single quantum dot // Physical Review B. — 2000. — Vol. 61. — № 16. — P. 10579–10582.
20. Melnikov V.A., Golovan L.A. et. al. Second-Harmonic Generation in Strongly Scattering Porous Gallium Phosphide // Applied Physics B: Lasers and Optics. — 2004. — Vol. 79 (2). — P. 225–229.

УДК 621.181; 621.548

## Импульсные технологии и получение наноструктурированных материалов

### Impulse technologies and production of nanostructured materials

Кусаиынов К.

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова (e-mail: kappas090108@mail.ru)

Мақалада су астындағы электр разрядын пайдалану арқылы өндірістік маңызы бар нанокұрылымды материалдарды алу технологиялары келтірілген. Табиғи пайда болған воллостанит, кварц және кремний минералдарын импульстік электр разрядымен өңдеу арқылы керекті құрылымды заттарды алу тәсілі баяндалған. Импульстік разрядпен әсер ету нәтижесінде Қарағанды және Шұбаркөл көмірлерінің физика-химиялық қасиеттерін өзгерту арқылы жағуға тиімді су-көмір араласпасын алу, қолдану мәселелері қарастырылған. Аталған технологияға байланысты іске асыру тәсілдері мен қондырғылар сұлбалері осы бағытта ғылыммен айналысатын студенттерге, магистранттарға және мамандарға пайдалы болу мүмкін.

The results of studies on the use of electric discharge under water for the development of impulse technology are presented. The technology of cleaning heat exchanger tubes of the scale is described. The results of optimization of electrical parameters of electrohydraulic apparatus are presented. The results of studies on the crushing and grinding of natural minerals, such as vollostanit, quartz and silicon are presented. The possibility of obtaining a coal-water slurry as a result of electric pulse treatment is shown.

Импульсные технологии, базирующиеся на использовании электрогидравлического эффекта в жидкости, находят широкое применение в таких технологических процессах, как интенсификация теплообмена, закрепление труб в трубных досках теплообменных аппаратов, дробление минеральных сред, очистка отливок, штамповка металлов, обработка промышленных отходов с целью извлечения ценных компонентов, отделения примесей от различного рода измельченных материалов.

В настоящей статье приведены результаты исследований по разработке и созданию электрогидроимпульсных технологий для получения наноструктурированных материалов, полученные сотрудниками кафедры инженерной теплофизики Карагандинского государственного университета им. Е.А. Букетова под руководством автора настоящей статьи.

Электрогидравлический эффект [1] представляет собой высоковольтный электрический разряд в жидкой среде. При формировании электрического разряда в жидкости выделение энергии происхо-