Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 2 — 1966

УДК 539.293 : 535.34

Я. А. РОЗНЕРИЦА

К ТЕОРИИ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ, ПОМЕЩЕННЫХ ВО ВНЕШНИЕ ПОЛЯ

Рассматривается вопрос о поглощении света в полупроводниках, помещенных во внешние параллельные электрические и магнитные поля, в области края основной полосы поглощения (прямые переходы). Получены общие выражения для коэффициента поглощения для разрешенных и запрещенных переходов, из которых можно получить известные формулы для коэффициента поглощения в отсутствие внешних полей, а также электрооптический и магнетоабсорбционный эффекты. Показано, что в слабом электрическом поле (при сохранении квантующего магнитного поля) коэффициент поглощения можно представить в виде трех членов, из которых один точно совпадает с коэффициентом поглощения света в отсутствие внешних полей, а остальные два имеют осциллирующий характер в зависимости от энергии фотона при постоянном электрическом и магнитном поле.

К настоящему времени появилось много работ, посвященных теории оптического поглощения в полупроводниках в области края основной полосы поглощения, как в отсутствие внешних полей [1], так и в присутствии только электрического [2] или только магнитного [3] поля.

В настоящем сообщении рассматривается вопрос о поглощении света полупроводниками во внешнем параллельном однородном электрическом и магнитном поле.

Для вычисления коэффициента поглощения в кристаллах вблизи края основной полосы для простых сферических зон используем метод δ-функции, основанный в работах Д. С. Буляницы [2, 4]. Согласно этому методу, образование электрона и дырки при поглощении фотона рассматривается как переход из некоторого «нулевого состояния» экситона, описываемого δ-функцией от относительного расстояния электрона и дырки $\psi_0=\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$, в конечное состояние, описываемое волновой функцией $\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$.

Если пренебречь взаимодействием между электроном и дыркой, то при наличии внешнего электрического и магнитного полей получим следующее уравнение для определения волновой функции конечного состояния:

$$\left[\frac{1}{2m_1}\left(\vec{p}_1+\frac{e}{c}\vec{A}_1\right)^2+\frac{1}{2m_2}\left(\vec{p}_2-\frac{e}{c}\vec{A}_2\right)^2-e\vec{F}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\right]\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)=$$
$$=E_i\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \qquad (1)$$

где индексы 1 и 2 относятся к электрону и дырке, e и m — заряд и эффективная масса носителя, $\vec{F}$ — вектор напряженности внешнего электрического поля, $\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{H}\times\vec{r}$ — вектор-потенциал внешнего магнитного поля напряженности $\vec{H}$, E_i — собственные значения энергии системы в конечном состоянии. В уравнении (1) можно перейти к относительным координатам $\vec{r}$ и координатам центра инерции $\vec{R}$, тогда решение полученного уравнения ищется в виде [5, 6]

$$\Psi_i(\vec{r},\vec{R}) = L^{-\frac{3}{2}}\cdot l^{\,i\left[(\vec{\varkappa}\cdot\vec{R})-\frac{e}{2\hbar c}\vec{H}\times\vec{R}\cdot\vec{r}\right]}\cdot\Phi(\vec{r}),$$

где L — протяженность основной области кристалла, $\vec{\varkappa}$ — волновой вектор центра инерции электрона и дырки.

Рассмотрим случай прямых переходов, причем, если учитывать, что начальное состояние описывается δ-функцией, то матричный элемент фотоперехода согласно работам [3, 5] равен

$$W_{0i} = \frac{e\mathscr{E}}{m_0\omega}\left[\vec{\xi}\cdot\vec{P}_{0i}(0)\cdot\Phi(0) - i\hbar\vec{M}_{0i}(0)\cdot\xi\cdot\vec{\nabla}_r\Phi(r)\,|_{r=0}\right] L^{\frac{3}{2}}\cdot\delta_{\vec{\varkappa},q}, \tag{2}$$

где m_0 — масса свободного электрона $\mathscr{E}$, $\vec{q}$ и ξ — амплитуда, волновой вектор и единичный вектор поляризации световой волны с частотой ω, $\vec{P}_{oi}(0)$ и $\vec{M}_{oi}(0)$ — известные из теории поглощения света матричные элементы между модулирующими множителями функций Блоха у границ зон при $\vec{k}=0$ [3, 6]. Первый член в квадратной скобке равенства (2) соответствует разрешенным прямым переходам, а второй — запрещенным.

После всего этого легко написать уравнение для определения волновой функции $\Phi(\vec{r})$. Исходя из того факта, что волновой вектор фотона $\vec{q}$ в рассматриваемой области длин волн очень мал по сравнению с волновым вектором электрона, в уравнении для определения $\Phi(\vec{r})$ в силу правила отбора $\vec{\varkappa}=\vec{q}\simeq 0$. Можно опустить все члены, содержащие волновой вектор центра инерции. Если направить вектора $\vec{F}$ и $\vec{H}$ по оси z, то уравнение для $\Phi(\vec{r})$ принимает вид [5]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-\frac{ie\hbar}{2\mu c}\frac{\Delta m}{M}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{e^2H^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)-\right.$$
$$\left.-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}-eFz\right]\Phi(\vec{r}) = E_i\Phi(\vec{r}), \tag{3}$$

где

$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2},\quad M=m_1+m_2;\quad \Delta m=m_1-m_2.$$

В уравнении (3) переменные разделяются, следовательно,

$$\Phi(\vec{r}) = f(x, y)\,g(z), \tag{4}$$

причем функции $f(x, y)$ и $g(z)$ удовлетворяют уравнениям

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)-\frac{ie\hbar}{2\mu c}\frac{\Delta m}{M}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{e^2H^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\right]f(x, y)=$$
$$=(E_i-\varepsilon)f(x, y); \tag{5}$$

и

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - eFz\right) g(z) = \varepsilon g(z). \tag{6}$$

Переходя в (5) к полярной системе координат, легко найти решение [7]

$$f(x, y) = \left[\frac{eH}{2\pi\hbar c}\frac{n!}{(n+|l|)!}\right]^{\frac{1}{2}} e^{i\varphi l} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{\frac{|l|}{2}} L_n^{|l|}(\rho), \tag{7}$$

где $n = 0, 1, 2\ldots$; $l = 0$; ± 1; $\pm 2\ldots$; $L_n^{|l|}(\rho)$ — обобщенные полиномы Лагера и через ρ обозначено

$$\rho = \frac{eH}{2\hbar c}(x^2 + y^2).$$

Решение уравнения (6) также известно (см., например, [7])

$$g(z) = \left(\frac{eF}{\pi\hbar^2\theta^2}\right)^{\frac{1}{2}} A_i\left[-\left(z + \frac{\varepsilon}{eF}\right)\sqrt[3]{\frac{2\mu eF}{\hbar^2}}\right], \quad \theta = \sqrt[3]{\frac{(eF)^2}{2\mu\hbar}}, \tag{8}$$

где ε — энергия движения в направление оси z, $A_i(t)$ функции Эйри.

Если за начало отсчета энергии принять дно зоны проводимости, то энергия начального и конечного состояния системы в квантующем магнитном поле равна [7]

$$E_0 = E_g, \ E_i = \varepsilon + E_{n,l},$$

$$E_{n,l} = \hbar\Omega\left[\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(l + |l|\frac{\Delta m}{M}\right)\right], \ \Omega = \frac{eH}{\mu c}, \tag{9}$$

где E_g — ширина запрещенной зоны.

Коэффициент поглощения света определяется по формуле [9]

$$\alpha = \frac{8\pi^2\omega}{n_0 c \mathscr{E}^2 L^3}\sum_{n,l}\int_0^\infty |W_{0i}|^2 \delta(E_i - E_0 - \hbar\omega)\, d\varepsilon, \tag{10}$$

где n_0 — показатель преломления вещества. Наличие δ-функции в выражении (10) указывает на то, что при фотопоглощении выполняется закон сохранения энергии.

Рассмотрим отдельно случай разрешенных и запрещенных переходов.

1. Для разрешенных прямых переходов матричный элемент, согласно формулам (2) и (4), равен

$$W_{0i} = \frac{e\mathscr{E}}{m_0\omega}|\vec{\xi}\cdot\vec{P}_{0i}(0)|\, f(0)\, g(0) L^{\frac{3}{2}}. \tag{11}$$

Вычисления показывают, что $f(0)$ отлична от нуля, если только $l=0$, при этом

$$f(0) = \left(\frac{eH}{2\pi\hbar c}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad g(0) = \left(\frac{eF}{\pi\hbar^2\theta^2}\right)^{\frac{1}{2}} A_i\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar\theta}\right).$$

По формуле (10) находим

$$\alpha(\omega, \vec{F}, \vec{H}) = \frac{A\hbar\Omega}{(\hbar\theta)^{\frac{1}{2}}}\sum_{n=0}^{\langle N\rangle}\left|A_i\left(-\frac{\hbar\omega - E_g - E_{n,0}}{\hbar\theta}\right)\right|^2, \tag{12}$$

$$A = \frac{2e^2}{n_0 m_0^2 c\omega}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} |\vec{\xi}\cdot\vec{P}_{0i}(0)|^2, \quad E_{n,0} = \hbar\Omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Здесь $\langle N\rangle$ — наибольшее целое число, определяемое из условия неотрицательности ε, т. е.

$$\hbar\omega - E_g - \hbar\Omega\left(N+\frac{1}{2}\right) \geqslant 0. \tag{13}$$

В частности, если внешнее электрическое поле стремится к нулю и аргумент функции Эйри принимает большие отрицательные значения, следовательно, можно воспользоваться асимптотическим выражением [8]

$$A_i(t) \simeq t^{-\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right). \tag{14}$$

Тогда с помощью (14) из формулы (12) получим выражение для коэффициента поглощения при наличии только магнитного поля [6]

$$\alpha(\omega, \vec{H}) = \frac{A\hbar\Omega}{2}\sum_{n=0}^{\langle N\rangle}\left[\hbar\omega - E_g - \hbar\Omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{15}$$

Для случая, когда $H\to 0$, в выражение (12) необходимо перейти от суммирования по n к интегрированию

$$\alpha(\omega, \vec{H}) = R\theta^{\frac{1}{2}}\int_{\beta}^{\infty} |A_i(t)|^2\, at, \tag{16}$$

где

$$\beta = \frac{E_g - \hbar\omega}{\hbar\theta}, \quad R = \frac{2e^2}{n_0 m_0^2 c\hbar\omega}\left(\frac{2\mu}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} |\vec{\xi}\cdot\vec{P}_{0i}(0)|^2.$$

2. Из формул (2) и (4) следует, что матричный элемент для запрещенных прямых переходов имеет вид

$$|W_{0i}| = \hbar\vec{M}_{0i}(0)\vec{\xi}\cdot\vec{\nabla}\,[f(x, y)\; g(z)]_{z=0}\, L^{\frac{3}{2}}. \tag{17}$$

В данном случае следует рассматривать продольную и поперечную поляризацию световой волны.

Пусть световая волна поляризована так, что $\vec{\xi}\,\|\,\vec{H}$, тогда оператор $\underline{\nabla}$ действует только на функцию $g(z)$, т. е.

$$g'_{(z)} = \left.\frac{dg(z)}{dz}\right|_{z=0} = \frac{(eF)^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}(\hbar\theta)^2} A_i'\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar\theta}\right),$$

а $f(0)$, как и для разрешенных переходов, отлична от нуля только при $l=0$. Таким образом, коэффициент поглощения для данного случая выражается так:

$$\alpha_{11}(\omega, \vec{F}, \vec{H}) = B\hbar\Omega(\hbar\theta)^{\frac{1}{2}}\sum_{n=0}\left|A_i'\left(-\frac{\hbar\omega - E_g - E_{n,0}}{\hbar\theta}\right)\right|^2, \tag{18}$$

где

$$B=\frac{2e^2\hbar^2}{cn_0m^2{}_0\omega}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{\frac{5}{2}}|\vec{M}_{0i}(0)|^2.$$

Если $\vec{\xi}\perp\vec{H}$, то оператор $\vec{\nabla}$ действует только на волновую функцию $f(x, y)$. При этом оказывается, что $\vec{\nabla}f(x, y)_{x,y=0}\neq 0$, когда $l=\pm 1$. Нетрудно показать, что квадрат матричного элемента фотоперехода равен

$$|W_{0i}|^2=\frac{e^2\mathcal{E}^2\hbar^2}{m_0^2\omega^2}|\vec{M}_{0i}(0)|^2\left(\frac{eH}{2\pi\hbar c}\right)^2(n+1)\frac{eF}{(\hbar\theta)^2}\left|A_i\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar\theta}\right)\right|^2. \tag{19}$$

Подстановка (19) в (10), суммирование по двум значениям квантового числа $l=\pm 1$ и интегрирование по ε, дают следующее выражение для коэффициента поглощения:

$$\alpha_\perp(\omega, \vec{F}, \vec{H})=\frac{B\hbar\Omega}{2(\hbar\theta)^{\frac{1}{2}}}\sum_{n=0}(n+1)\left[\left|A_i\left(-\frac{\hbar\omega-E_g-E_{n,1}}{\hbar\theta}\right)\right|^2+\right.$$

$$\left.+\left|A_i\left(-\frac{\hbar\omega-E_g-E_{n,2}}{\hbar\theta}\right)\right|^2\right], \tag{20}$$

где

$$E_{n,1,2}=\hbar\Omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\hbar\Omega_{1,2},\quad \Omega_{1,2}=\frac{eH}{m_{1,2}c}.$$

Как и в случае разрешенных прямых переходов, при $\vec{F}\to 0$ получим результаты работы [6], а при $\vec{H}\to 0$ результаты работы [9].

Рассмотрим случай, когда магнитное поле сохраняет свое квантующее действие, а электрическое поле слабое, так что

$$a=\frac{\hbar\omega-E_g}{\hbar\theta}\gg 1. \tag{21}$$

Помимо этого известно, что квантующее магнитное поле приводит к увеличению ширины запрещенной зоны и, таким образом, имеет смысл рассматривать поглощение таких фотонов, энергия которых $\hbar\omega>E_g$. Тогда при сохранении условия (21) аргумент функции Эйри принимает большие отрицательные значения; это дает возможность воспользоваться асимптотическим выражением (14).

Выражение для коэффициента поглощения, например (12), можно преобразовать, воспользовавшись формулой Пуассона [11]

$$\sum_{n=0}^{\infty}f\left(n+\frac{1}{2}\right)=\sum_{p=-\infty}^{\infty}(-1)^p\int_0^{\infty}e^{2\pi ipx}f(x)\,dx. \tag{22}$$

Согласно условию (13) верхний предел в сумме формулы (12) конечен. Это приводит к ограничению верхнего предела интеграла, входящего в правую часть формулы Пуассона (22).

С помощью (14) и (22) выражение для коэффициента поглощения (12) преобразуется:

$$\alpha(\omega, \vec{F}, \vec{H}) = A(\hbar\omega - E_g)^{1/2}\left\{1 + \int_0^1 \sin\left(\frac{4}{3}a^{3/2}x^3\right)dx + \right.$$

$$\left. + 2\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p\left[\int_0^1 \cos u(1-x^2)\,ax + \int_0^1 \sin\left(\frac{4}{3}a^{3/2}x^3\right)\cos u(1-x^2)\,dx\right]\right\}, \tag{23}$$

где

$$u = \frac{2\pi p(\hbar\omega - E_g)}{\hbar\Omega}. \tag{24}$$

Интегралы, входящие в (23) при больших значениях a и u, могут быть вычислены приближенным методом. В результате получим

$$\alpha(\omega, \vec{F}, \vec{H}) \simeq A(\hbar\omega - E_g)^{1/2} - \frac{A}{4}\frac{(\hbar\theta)^{3/2}}{\hbar\omega - E_g}\cos\left[\frac{4}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\theta}\right)^{3/2}\right] +$$

$$+ 2A\left(\frac{\hbar\Omega}{2}\right)^{1/2}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^p}{\sqrt{p}}\cos\left[\frac{1}{3}\left(\frac{\pi p\theta^3}{\Omega}\right)^3\right]\times$$

$$\times\cos\left[\frac{2\pi p(\hbar\omega - E_g)}{\hbar\Omega} - \frac{1}{3}\left(\frac{\pi p\theta}{\Omega}\right)^3 - \frac{\pi}{4}\right]. \tag{25}$$

Из данного выражения видно, что первый член точно совпадает с коэффициентом поглощения света в отсутствие внешних полей, в то время как остальные два члена зависят от величин напряженностей электрического и магнитного поля и имеют осциллирующий характер в зависимости от энергии фотона.

Второй член в (25) осциллирует, если только энергия фотона изменяется на величину

$$\Delta(\hbar\omega) = \frac{\pi(\hbar\theta)^{3/2}}{(\hbar\omega - E_g)^{1/2}}. \tag{26}$$

Таким образом, по мере возрастания энергии фотона амплитуда и период осцилляции второго члена в (25) уменьшаются.

Последний член в выражении (25) также осциллирует с изменением энергии фотона на величину

$$\Delta(\hbar\omega) = \frac{\hbar\Omega}{p}, \quad p = 1;\ 2;\ 3;\ \ldots \tag{27}$$

Амплитуда осцилляций в данном случае зависит только от величин напряженностей внешних полей $\vec{F}$ и $\vec{H}$ и от индекса суммирования. Следовательно, с увеличением энергии фотона амплитуда и период осцилляции уменьшаются только по мере возрастания индекса суммирования в (25).

Если выполняется условие (21), то в квантующем магнитном поле амплитуда осцилляций второго члена выражения (25) меньше, чем амплитуды осцилляций последнего члена. Это означает, что в этом случае в экспериментах будут главным образом наблюдаться осцилляции, описываемые последним членом. Постановка эксперимента по исследованию коэффициента поглощения света в параллельные электрические и магнитные поля даст возможность наряду с магнетоабсорбционным эффектом использовать магнетоэлектрооптический осцилляционный эффект для определения приведенной эффективной массы носителей тока. При этом в последнем случае амплитуда осцилляций зависит от двух внешних параметров $\vec{F}$ и $\vec{H}$.

Применяя формулу Пуассона (22) к выражению (15) для коэффициента поглощения в присутствии только магнитного поля, получим результат, который точно совпадает с результатом формулы (25) при $\vec{F}=0$. При $\vec{H}=0$ и слабом электрическом поле получим

$$\alpha(\omega, \vec{F}) = A(\hbar\omega - E_g)^{1/2} - \frac{A}{4}\frac{(\hbar\theta)^{3/2}}{\hbar\omega - E_g}\cos\left[\frac{4}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\Theta}\right)^{3/2}\right]. \quad (28)$$

Отметим, что аналогичное выражение было получено и в работе Галлавэя [2].

Автор выражает искреннюю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу и А. Г. Миронову за просмотр работы и ценные замечания, а также В. С. Вавилову за активное участие в обсуждении работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hall H., Bardeen J., Blatt F. L. Phys. Rev., **95**, 559, 1954.
2. Келдыш Л. В. ЖЭТФ, **34**, 1138, 1958; Franz W., Naturforsch, **13A**, 484, 1958; Буляница Д. С. ЖЭТФ, **38**, 1201, 1960; Gallaway J. Phys. Rev., **130**, 549, 1963.
3. Elliott R. J. и др. Proc. Phys. Soc., **72**, 553, 1958.
4. Буляница Д. С. «Вестн. ЛГУ», № 4, 1960.
5. Старостин Н. В. «Вестн. ЛГУ», № 10, 1962.
6. Lax B., Zwerdling S. Progress in Semiconductors, **5**, 236, 1960.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
8. Dexster D. L. Photoconductivity Conference Atlantic City, Nov. 1954, N. Y., 1958.
9. Tharmalingam K. Phys. Rev., **130**, 2204, 1963.
10. Dingl R. B. Proc. Roy. Soc., **A211**, 500, 1952.

Поступила в редакцию
7. 7 1964 г.

Кафедра
полупроводников