

Р. КАЙПЕР

КОЭФФИЦИЕНТ ПОГЛОЩЕНИЯ В ОБЛАСТИ $\hbar\omega > E_g$ ПРИ НАЛИЧИИ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ

Для легированного полупроводника с зонной структурой специального типа учитывается влияние резонансных состояний на поведение коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$. Показывается, что для оптических энергий выше края поглощения $\hbar\omega > E_g$ в спектре поглощения возникают характерные пороги и пики, величина и положение которых зависят от концентрации примеси n , от положения E_V и ширины Γ_V резонансных уровней и от эффективных масс m_v и m_c для валентной зоны и зоны проводимости.

§ 1. Введение. Коэффициент поглощения

При исследовании оптических спектров твердых диэлектриков в течение многих лет внимание было сосредоточено на энергетической области вблизи края собственного поглощения или ниже его, $\hbar\omega \leq E_g$. Рассматривались оптические переходы между экситонными уровнями, между примесными уровнями и в кристаллических точках, где $\nabla[E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k})] = 0$. Однако электроны в полупроводнике могут занимать не только связанные (экситонные и примесные уровни в запрещенной зоне) или квазисвободные (зоны), но и резонансные состояния. Последние хорошо известны в квантовой теории рассеяния; в полупроводнике они могут возникнуть, если, например, экситонные или примесные уровни совпадают с энергетическим континуумом одной из зон [1—5]. Резонансные состояния тесным образом связаны с зонной структурой и в легированном полупроводнике с потенциалом примеси.

В настоящей работе мы исследуем влияние резонансных состояний, обусловленных примесью, на поведение коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ в области выше края поглощения, $\hbar\omega > E_g$. Предполагаемая зонная модель, имеющая некоторые черты зонной структуры Ge, Si, InSb, изображена на рис. 1. Допустим, что кристалл легирован акцепторами. Тогда акцепторные уровни, возникающие над зоной v_3 , находятся в энергетическом континууме зон v_1 и v_2 . Для простоты будем рассматривать только один уровень при $E = E_0$ и его взаимодействие с подзонами v_1 и v_2 . Вследствие резонансного рассеяния валентных электронов на уровне E_0 уровень имеет конечную ширину Γ_0 и возникает связь между зонами v_1 и v_2 .

Для коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ напишем разложение

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2, \quad (1)$$

где индексы 0, 1 и 2 относятся к уровню E_0 и к зонам v_1 и v_2 ; ω — частота падающего излучения. При вычислении α_i ($i=0, 1, 2$) [6] будем исходить из стандартного выражения

$$\alpha_i(\omega) = \frac{8e^2 |p_{ci}|^2}{m^2 c \omega \epsilon^2} \int \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dE \langle \text{Im} G_c(\bar{k}, E) \text{Im} G_i(\bar{k}, E - \hbar\omega) \rangle, \quad (2)$$

где $G_i(\bar{k}, E)$ описывает Фурье-образ запаздывающей одночастичной антикоммутирующей функции Грина. Скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по всем конфигурациям примеси. В формуле (2) предполагается, что состояния $|i\rangle$ валентных зон заняты, а состояния $|c\rangle$ в зоне проводимости не заняты, что переходы из состояний $|i\rangle$ в состояния $|c\rangle$ разрешены ($|p_{ci}|^2 \neq 0$) и происходят только вследствие оптического возбуждения. Пренебрежем рассеянием электронов зоны проводимости на потенциале примеси, тогда

$$\text{Im} G_c(\bar{k}, E) = \pi \delta(E - W_c(\bar{k}))$$

и

$$\alpha_i(\omega) = \frac{8\pi e^2 |p_{ci}|^2}{m^2 c \omega \epsilon^2} \int \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^3} \langle \text{Im} G_i(\bar{k}, W_c(\bar{k}) - \hbar\omega) \rangle. \quad (3)$$

§ 2. Функция Грина и расчет $\alpha_i(\omega)$

Рассмотрим взаимодействие электронов зон v_1, v_2 с атомами примеси. Взаимодействие электронов друг с другом учитывается экрани-

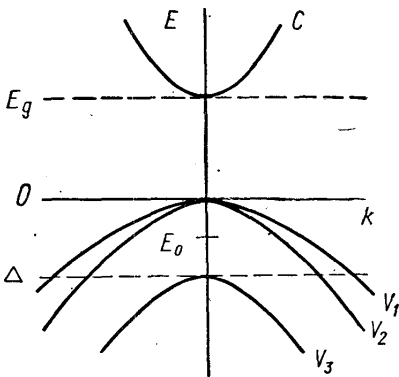


Рис. 1. Зонная модель согласно закону дисперсии

$$W_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_c} k^2, \quad W_{v_i}(k) = \Delta \delta_{0i} - \frac{\hbar^2}{2m_i} k^2, \quad i = 1, 2, 3$$

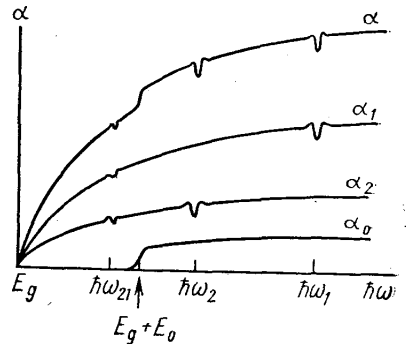


Рис. 2. Коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ согласно разложению $\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2$

рованием потенциала примеси. Перенормировкой электронной энергии вследствие электрон-электронного взаимодействия пренебрегаем. В при-

ближении эффективной массы имеем следующую систему уравнений для функции Грина

$$G_{ij}(\bar{k}, \bar{k}', E, \bar{R}_1 \dots \bar{R}_N):$$

$$\{E\delta_{ie} - D_{ie}(\bar{k})\} G_{ej}(\bar{k}, \bar{k}', E, \bar{R}_1 \dots \bar{R}_N) -$$

$$- \int \frac{d\bar{k}''}{(2\pi)^3} V(\bar{k} - \bar{k}'') \delta_{ie} \sum_{p=1}^N e^{-i(\bar{k} - \bar{k}'' \cdot \bar{R}_p)} G_{ej}(\bar{k}'', \bar{k}', E, \bar{R}_1 \dots \bar{R}_N) = -\delta_{ij} \delta(\bar{k} - \bar{k}'). \quad (4)$$

Здесь индексы i, j, l обозначают зоны v_1, v_2 . Экранированный потенциал примеси имеет вид

$$U_s(\bar{r}) = \sum_{p=1}^N V(\bar{r} - \bar{R}_p),$$

где $V(\bar{r} - \bar{R}_p)$ — экранированный потенциал отдельного атома примеси с координатой \bar{R}_p , N — полное число атомов примеси. В уравнении (4) $V(\bar{k})$ есть Фурье-образ потенциала $V(\bar{r})$, а $\{D_{ij}(\bar{k}) - E\delta_{ij}\}$ — матрица, из определителя которой в случае исчезающего электронно-примесного взаимодействия следует закон дисперсии $W_i = W_i(\bar{k})$ ($i=1, 2$). Уравнение (4) для одной зоны рассматривалось в работах [6—8]. Для нашей модели с двумя зонами дополнительные трудности не возникают.

Разложим зависящую от координат примеси функцию Грина в итерационный ряд и затем усредним по всем конфигурациям примеси. При этой стандартной процедуре мы предполагаем, что распределение примесных атомов в кристалле хаотическое, и координаты их не коррелированы. Ограничимся рассмотрением макроскопически однородного полупроводника. Тогда усредненная функция Грина зависит только от \bar{k} и E :

$$\langle G_{ij}(\bar{k}, \bar{k}', E, \bar{R}_1 \dots \bar{R}_N) \rangle = G_{ij}(\bar{k}, E) \delta(\bar{k} - \bar{k}'). \quad (5)$$

Будем описывать влияние примеси на усредненную функцию Грина $G_{ij}(\bar{k}, E)$ массовым оператором $M_{ij}(\bar{k}, E)$ [8]. В модели двух параболических и сферических зон $G_{ij}(\bar{k}, E)$ имеет вид

$$G(\bar{k}, E) = - \frac{1}{\text{Det}} \begin{pmatrix} E - D_{22}(\bar{k}) - M_{22}(\bar{k}, E) & M_{12}(\bar{k}, E) \\ M_{21}(\bar{k}, E) & E - D_{11}(\bar{k}) - M_{11}(\bar{k}, E) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где

$$\text{Det} \equiv [E - D_{11}(\bar{k}) - M_{11}(\bar{k}, E)][E - D_{22}(\bar{k}) - M_{22}(\bar{k}, E)] -$$

$$- M_{12}(\bar{k}, E) M_{21}(\bar{k}, E). \quad (7)$$

Ограничимся в дальнейшем случае слабого легирования

$$nr_0^3 \ll 1 \quad (8)$$

(n — концентрация примеси, r_0 — радиус экранирования). Тогда массовый оператор $M_{ij}(\bar{k}, E)$ [9] представляется в виде

$$M_{ij}(\bar{k}, E) = nT_{ij}(\bar{k}, \bar{k}, E), \quad (9)$$

где T — матрица рассеяния. Она описывает все реальные и виртуальные процессы рассеяния на одном центре. В нашей модели рассматривается только одно резонансное состояние $|0\rangle$ с энергией E_0 , которое распадается с характерным временем $\frac{2\hbar}{\Gamma_0}$ по одному из каналов

$$|0\rangle \begin{cases} \nearrow |1\rangle \\ \searrow |2\rangle \end{cases}$$

на свободные состояния $|1\rangle, |2\rangle$. В энергетической области $E \simeq E_0$ можно пренебречь потенциальным рассеянием по сравнению с резонансным. Тогда T имеет вид

$$T_{ij} = \frac{t_{i0}t_{0j}}{E - E_0 + i\frac{\Gamma_0}{2}}, \quad (10)$$

где t_{i0} — матричные элементы оператора t из работы [10].

Функцию Грина G_0 резонансного состояния $|0\rangle$ можно записать в виде

$$G_0(E) = -\frac{1}{E - E_0 + i\frac{\Gamma_0}{2}}. \quad (11)$$

При вычислении $\alpha(\omega)$ будем исходить из (1), (3), (6), (7), (9), (11)¹. В $G_{ii}(\vec{k}, E)$ мы пренебрежем малой поправкой к энергии и ограничимся случаем не слишком сильного затухания. В этих условиях можно заменить функцию $M_{ij}(\vec{k}, E)$ в (6) ее значением для $E = W_j(\vec{k})$. В изотропной модели мы имеем массовый оператор, зависящий только от k :

$$M_{ij}(k) = n2\pi \frac{\hbar^2}{m_j} \frac{1}{k_j} \frac{g_i g_j}{W_j(k) - E_0 + i\frac{\Gamma_0}{2}}, \quad (12)$$

где $g_1^2 + g_2^2 = \Gamma_0$, а величины k_j определяются уравнением $W_j(k) - E_0 = 0$ ($i = 1, 2$). Интеграл в (3) вычисляется по теории вычетов. При условии

$$N = \max \frac{4N_{ij}}{\left(\frac{m_i}{m} \frac{\Gamma_0}{2}\right)^2} \ll 1, \quad (13)$$

$$N_{ij} = n \frac{m_{ci} m_i}{m^2} \frac{E_0}{k_j^3} - 4\pi g_i g_j, \quad \frac{1}{m_{ci}} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_i},$$

находим полюсы подынтегрального выражения с помощью теории возмущений. С точностью до второго порядка по параметру N получим

$$\alpha_i = \alpha_i^{(0)} \{1 + K_i^{(1)} + K_i^{(2)} + \Delta K_i^{(2)}\}, \quad (14)$$

где

$$\alpha_i^{(0)} = \frac{2e^2 |p_{ci}|^2}{m^2 c \omega \epsilon} \left(\frac{2m_{ci}}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\hbar\omega - E_g} \quad (15)$$

¹ Величины $\alpha_i(\omega)$, $i=1, 2$ вычисляются из следа матрицы (6). Обозначим диагональные элементы $G_{ii} \equiv \langle G_i \rangle$ ($i=1, 2$), что соответствует обозначениям в [1] и [3].

есть известное выражение для коэффициента поглощения в отсутствие примесного рассеяния, а $K_i^{(1)}$, $K_i^{(2)}$, $\Delta K_i^{(2)}$ — поправки, которые обсуждаются в § 3.

Коэффициент поглощения α_0 для оптических переходов с уровня E_0 в зону проводимости получается из (3) и (11):

$$\alpha_0 = \frac{2e^2 |p_{c0}|^2 nr_0^3}{m^2 c \omega \varepsilon^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt[4]{(\hbar\omega - E_g - E_0)^2 + \left(\frac{\Gamma_0}{2} \right)^2}. \quad (16)$$

§ 3. Обсуждение результатов

В случае слабого легирования, $nr_0^3 \ll 1$ предположим существование резонансного уровня с энергией E_0 и шириной Γ_0 . Если оптические переходы из резонансного уровня в зону проводимости разрешены, то в коэффициенте поглощения возникает порог при энергии $E_g + E_0$, имеющий форму (16).

Взаимодействие между резонансным уровнем E_0 и валентными зонами мы учитывали по теории возмущений. Согласно (14) к коэффициенту поглощения $\alpha^{(0)}(\omega)$ идеального кристалла добавляются следующие поправки.

Поправка $K^{(1)} \sim N$ имеет вид

$$K_i^{(1)} \simeq N_{ii} \left\{ 2 \frac{\left[\frac{m_{ci}}{m} (\hbar\omega - E_g) - \frac{m_i}{m} E_0 \right]^2 - \left[\frac{m_i}{m} \frac{\Gamma_0}{2} \right]^2}{\left\{ \left[\frac{m_{ci}}{m} (\hbar\omega - E_g) - \frac{m_i}{m} E_0 \right]^2 + \left[\frac{m_i}{m} \frac{\Gamma_0}{2} \right]^2 \right\}^2} - \frac{1}{\frac{m_i}{m} E_0} \cdot \frac{\frac{m_{ci}}{m} (\hbar\omega - E_g) - \frac{m_i}{m} E_0}{\left[\frac{m_{ci}}{m} (\hbar\omega - E_g) - \frac{m_i}{m} E_0 \right]^2 + \left[\frac{m_i}{m} \frac{\Gamma_0}{2} \right]^2} \right\}. \quad (17)$$

Вследствие резонансного рассеяния валентных электронов на уровне E_0 в $\alpha_i(\omega)$ ($i=1, 2$) возникают отрицательные пики при частотах

$$\hbar\omega_1 = E_g + \left(1 + \frac{m_1}{m_c} \right) E_0, \quad \hbar\omega_2 = E_g + \left(1 + \frac{m_2}{m_c} \right) E_0$$

(рис. 2). Согласно выражению (17) резонансные пики в $\alpha(\omega)$ имеют характерную асимметрию.

Поправка $K^{(2)} \sim N^2$ описывает влияние резонансных переходов вида $|1\rangle \rightarrow |0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |0\rangle \rightarrow |2\rangle$ на $\alpha(\omega)$. В $\alpha_i(\omega)$ возникают поправки при $\hbar\omega_i$, где уже учтены вклады первого порядка N . Поскольку $|K^{(2)}| \ll |K^{(1)}|$, этими поправками к $\alpha(\omega)$ можно пренебречь.

Поправка $\Delta K^{(2)} \sim N^2$ возникает вследствие резонансных переходов $|1\rangle \rightarrow |0\rangle \rightarrow |2\rangle$, $|2\rangle \rightarrow |0\rangle \rightarrow |1\rangle$ и описывает эффект связи зон v_1 , v_2 при резонансном рассеянии на уровне E_0 . В $\alpha(\omega)$ производятся пики при частотах [9]

$$\hbar\omega_1, \hbar\omega_2, \hbar\omega_{12} = E_g + \left(\frac{m_1}{m_2} + \frac{m_1}{m_c} \right) E_0, \quad \hbar\omega_{21} = E_g + \left(\frac{m_2}{m_1} + \frac{m_2}{m_c} \right) E_0.$$

При $\hbar\omega_1$, $\hbar\omega_2$ пренебрежем $\Delta K^{(2)}$ по сравнению с $K^{(1)}$. Тогда останутся поправки второго порядка к $\alpha(\omega)$ при $\hbar\omega_{12}$, $\hbar\omega_{21}$, которые выде-

ляются на гладком фоне. Схематически поведение $\alpha(\omega)$ представлено на рис. 2, при $n_0^3 \sim 10^{-1}$, $N \sim 10^{-1}$, $\frac{\Gamma_0}{E_0} \sim 10^{-1}$, $m_1 : m_2 \approx 3 : 1$, $m_c \approx 2 m_2$.

Автор благодарит В. Л. Бонч-Бруевича за предложенную тему и многие полезные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kaplan H. J. Phys. Chem. sol., **24**, 1593, 1963.
2. Peterson G. A. Proc. of the Intern. Conf. on the Phys. of Semicond. Paris, 1964.
3. Phillips J. Semicond. and Semimet. Vol. 3, Optical Prop. of III—V Comp. Academic Press N. Y., London, 1967.
4. Бонч-Бруевич В. Л., Другова А. А. «Физика и техника полупроводников», **2**, 794, 1968.
5. Bassani F., Iadonisi G., Preziosi V. Phys. Rev., **186**, 735, 1969.
6. Бонч-Бруевич В. Л. В сб.: «Вопросы электронной теории легированных полупроводников». М., Изд. ВИНТИ, 1965.
7. Edwards S. F. Phil. mag., **33**, 1020, 1958.
8. Касаманян З. А. «Физика и техника полупроводников», **2**, 1709, 1968.
9. Keiper R. Phys. stat. sol., **44**, 593, 1971.
10. Shore V. W. Rev. Mod. Phys., **39**, 439, 1967.

Поступила в редакцию
22.2 1971 г.

Кафедра
физики полупроводников